universität wien

DIPLOMARBEIT

Titel der Diplomarbeit

Die Grundprinzipien der Quantentheorie in konventioneller und Feynmanscher Darstellung. Anwendungen auf elementare Problemstellungen und im Physikunterricht

Verfasser

Heiko Krug

angestrebter akademischer Grad

Magister der Naturwissenschaften

Wien, 2012

Studienkennzahl	A190-412-344
Studienrichtung	Lehramtsstudium UF Physik UF Englisch
Betreuer	A.o. Univ. Prof. Dr. Helmut Neufeld

Vorwort

Bei der Anfertigung der vorliegenden Diplomarbeit waren mir sehr viele Menschen hilfreich, von denen ich einige besonders hervorheben möchte.

Vor allem möchte ich mich bei meinem Betreuer A.o. Univ. Prof. Dr. Helmut Neufeld bedanken, der mein Interesse am Thema meiner Diplomarbeit geweckt hat und mir bei offenen Fragen immer helfend zur Seite stand. Auch für die schnelle Korrektur der angefertigten Entwürfe und die vielen Tipps für die Formatierung in LaTex bin ich sehr dankbar.

Weiterhin möchte ich mich bei meiner Frau Chan-Chuan Krug-Lai bedanken, ohne deren tatkräftige Unterstützung vieles nicht möglich gewesen wäre. Meine Frau war und ist eine treibende Kraft in meinem Leben.

Dank gilt auch meinem Vater, der mich in meiner Entscheidung Deutschland zu verlassen nie kritisiert hat und so viele meiner Aktivitäten gefördert hat.

Meinem Bruder Kay-Uwe Krug möchte ich auf diesem Wege Dank aussprechen, dass er mir mit unzähligen Ideen bei Computerproblemen in den letzten Jahren geholfen hat. Die hochwertigen Screenshots älterer Programme im Kapitel 5 sind erst durch seine Ideen möglich geworden.

Auch meinem langjährigen Freund Torsten Ewert möchte ich Dank für die vielen fruchtbaren Gespräche und Hinweise zur Gestaltung der Diplomarbeit aussprechen.

Zusammenfassung

Die vorliegende Diplomarbeit für das Lehramt Physik beschäftigt sich mit den Inhalten, die im Rahmen der Quantentheorie an der Schule unterrichtet werden sollten. Das Anliegen der vorliegenden Diplomarbeit ist es, Lehrern einen tieferen Einblick in die mathematischen Grundlagen einfacher Probleme der Quantentheorie zu vermitteln sowie Animationen für einen anschaulicheren und mit einfachen mathematischen Rechenregeln auch fachübergreifend umsetzbaren Unterricht zu bewerten.

Um diese Aufgabe zu bearbeiten, wird im Kapitel (1) eine Übersicht des derzeitigen Standes aus Informationen bezüglich

- des Lehrplanes für Physik,
- der Bildungsstandards für das Fach Mathematik an Allgemeinbildenden Höheren Schulen (AHS),
- einigen Lehrbuchbeispielen für das Fach Physik und
- drei Unterrichtskonzepten

gegeben werden. Im Kapitel (2) werden übersichtsweise die Prinzipien sowohl der konventionellen Betrachtung der Quantentheorie als auch der Feynmansche Ansatz vorgestellt. Dann erfolgt im Kapitel (3) eine ausführliche Beschreibung der konventionellen Sichtweise anhand folgender Beispiele der Quantentheorie:

- die Wechselwirkung eines Teilchens mit einem Dirac-Potential,
- die Wechselwirkung eines Teilchens mit zwei Dirac-Potentialen,
- die Wechselwirkung eines Teilchens mit einer Potentialbarriere und
- die Rutherfordstreuung.

Die Feynmansche Betrachtung dieser Probleme wird im Kapitel (4) vorgestellt und um die Reflexion und Brechung eines Photons an einer dünnen Glasschicht erweitert. Die Inhalte der Kapitel (3) und (4) sind als Hintergrundinformation für den Lehrer gedacht und nicht für den Einsatz in der Schule bestimmt. Jedoch sind diese beiden Kapitel aus hochschuldidaktischer Sicht interessant, weil diese Inhalte als Teil einer Hochschulveranstaltung zur Einführung der Quantentheorie verwendet werden können. Abschließend erfolgt im Kapitel (5) eine Evaluierung von Animationen für den Einsatz im Physikunterricht, um die Prinzipien Feynmanschen Darstellung der Quantentheorie zu illustrieren.

Inhaltsverzeichnis

1 Quantentheorie in der Schule **1**

2 Grundlagen der Quantentheorie **9**
2.1 Klassische Mechanik 9
2.2 Quantentheorie aus konventioneller Sicht 11
2.3 Die Feynmansche Sicht der Quantentheorie 13

3 Konventionelle Betrachtung ausgewählter quantentheoretischer Beispiele **15**
3.1 Wechselwirkung mit einem Dirac-Potential 15
3.1.1 Diskussion der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten 16
3.2 Wechselwirkung mit zwei Dirac-Potentialen 18
3.3 Wechselwirkung mit einer Potentialbarriere 21
3.4 Die Rutherfordstreuung 24

4 Beschreibung ausgewählter quantentheoretischer Beispiele nach Feynman **33**
4.1 Grundlagen des Pfadintegrals nach Feynman 33
4.2 Betrachtungen des zeitabhängigen Falls 40
4.3 Die Störungsmethode in der Quantenmechanik 41
4.4 Bestimmung der Ausbreitungskerne 43
4.5 Die Bestimmung des Ausbreitungskerns K_V 47
4.6 Die Störungsentwicklung für die Wellenfunktion 48
4.7 Wechselwirkung mit einem Diracpotential 49
4.8 Berechnung der Amplituden an zwei Dirac-Potentialen 54
4.9 Berechnung der Amplituden an einer Potentialbarriere 60
4.10 Rutherfordstreuung mittels Pfadintegral 67
4.11 Reflexion und Brechung 72
4.11.1 Der harmonische Oszillator und seine Energieeigenwerte 72
4.11.2 Energiestromdichte und Impulsstromdichte in Heaviside Einheiten 79
4.11.3 Das freie elektromagnetische Feld aus ungekoppelten harmonischen Oszillatoren 85

4.11.4 Quantisierung des elektromagnetischen Feldes 91
4.11.5 Teilcheninterpretion des elektromagnetischen Feldes . . . 91
4.11.6 Reflexion und Brechung an einer Glasscheibe 93

5 Bewertung von Material für die Vermittlung von Quantentheorie 101
5.1 Animationen für den Einsatz im Unterricht und in Vorlesungen 101
5.2 Hochschuldidaktische Einstiege in die Quantentheorie 116

A Anhang - Prinzip der kleinsten Wirkung 123

B Anhang - Varianten des Grundprinzips 4 127

C Anhang - Wechselwirkung mit einem Dirac-Potential 131

D Anhang - Wechselwirkung mit zwei Dirac-Potentialen 135

E Anhang - Wechselwirkung mit einer Potentialbarriere 137

F Anhang - Ausbreitungskern eines freien Teilchens 143

G Anhang - Reihenentwicklung für zwei Dirac-Potentiale 145

H Anhang - Berechnung der Potentialbarriere nach Feynman 147

I Anhang - Reihenentwicklung für die Potentialbarriere 151

J Anhang - Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren 155

K Anhang - Lösung der Differentialgleichung für den Grundzustand 159

L Anhang - Quantisierung des elektromagnetischen Feldes 163

M Anhang - Bestimmung der Wellenzahl für rotes Licht 169

Literaturverzeichnis 171

1 Quantentheorie in der Schule

In dieser Arbeit sollen Animationen vorgestellt werden, die nur in der Oberstufe zum Einsatz kommen sollten. Der Grund für diese Einschränkung liegt in der vorausgesetzten mathematischen Grundlage der Schüler. Erst in der Klasse 6 der AHS werden den Schülern die notwendigen Grundkenntnisse der Wahrscheinlichkeitsrechnung vermittelt. Daher sind diese Animationen auch von hochschuldidaktischem Interesse. In Klasse 7 wird nach Lehrplan eine weitere mathematische Hilfe für die Quantentheorie eingeführt, die komplexen Zahlen. Allerdings wird im Lehrplan nicht genau spezifiziert, wie tief der jeweilige Themenbereich vermittelt werden soll. Dazu zählen der Zufallsversuch, der Wahrscheinlichkeitsbegriff sowie das Arbeiten mit der Additions- und Multiplikationsregel der Wahrscheinlichkeit. Neben der inhaltlichen Anknüpfung zum Thema Quantentheorie gibt es auch noch Verbindungen in den Bereichen der Ziele und didaktischen Grundsätze der Fächer Mathematik und Physik, die eine fächerübergreifende Unterrichtsgestaltung erlauben würden [BMUKK-Mathematik 2004, BMUKK-Physik 2004, Siller 2008].
Der Lehrplan für Physik an den Oberstufen der AHS beschreibt folgende Lehrinhalte für die 7. und 8. Klasse:

- "die bisher entwickelten methodischen und fachlichen Kompetenzen vertiefen und darüber hinaus Einblicke in die Theorieentwicklung und das Weltbild der modernen Physik gewinnen

- verstärkt Querverbindungen mit anderen Bereichen knüpfen können

- Verständnis für Paradigmenwechsel an Beispielen aus der Quantenphysik" [BMUKK-Physik 2004]

Die Lehrbücher durchlaufen vor der Zulassung für die Benutzung in österreichischen Schulen ein Aprobationsverfahren. Zur Erlangung der Aprobation müssen die Forderungen des Lehrplans bezüglich aller Aspekte erfüllt sein. Im folgenden werden Inhalte aus einigen Lehrbüchern der 7. und 8. Klasse vorgestellt, die sich dem Thema Quantentheorie als Paradigmenwechsel annehmen. Die Liste basiert auf einer Sichtung einiger Lehrbücher, inklusive Lehrwerke basierend auf

alten Lehrplänen, und kann folglich nicht als abgeschlossen gelten. Eine Vertiefung dieser Analyse kann im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht geleistet werden.

- Big Bang Physik 7 - Quantenmechanik **mit** Erwähung von Feynman ohne weiteren Bezug zum Zeigermodell [Apolin 2008]
- Physik 3 - Quantenphysik **mit** einigen Bezügen und Bildern zu Feynman's Zeigermodell aus QED [Bader/Dorn 2007]
- Physik 7 - Quanten ohne Bezug zu Feynman [Sexl 2006]
- Physik 8 - Vertiefung der Quantenphysik, aber ohne Bezug zu Feynman [Sexl 2007]
- Physik compact 8 - Erfolge und Krise der klassischen Physik ohne Verbindung zu Feynman [Jaros 2007]
- Physik compact 7 - Quantenphysik - von klassischen Teilchen über Wellen zu Quanten ohne Bezug zu Feynman [Jaros 2007]
- Physik für die Sekundarstufe II - Atomphysik mit Grundlagen der Quantenphysik [Schreiner 1978]
- Faszination Physik 3+4 - Quantenphysik ohne Bezug zu Feynman [Putz 2009]
- Von der Physik 4 - Einführung in die Quantenphysik mit dem Photoeffekt aber keine Bezüge zu Feynman [Hager 2011]
- Physik HAK - Überblick zur Quantenphysik mit Begriff Wahrscheinlichkeitswelle ohne Wahrscheinlichkeitsamplitude, Betragsquadrat, Feynman's QED [Kraker 2003]
- Physik Energie, Raum, Zeit (für HAK) - keine Quantenphysik [Rameis 2008]
- Technische Physik - keine Quantenphysik [Herr 2011]
- Ganz klar Physik 4 (Unterstufenlehrbuch) - Welt der Quanten als Einführung [Gruber 2008]

Bis auf die Titel *Big Bang Physik 7* und *Physik 3* beschränken sich alle anderen Werke auf die konventionelle Betrachtung der Quantenphysik mit einem Hang zur philosophischen Diskussion der Quantentheorie basierend auf dem langjährigen Disput zwischen Bohr und Einstein.

Das Lehrbuch Big Bang Physik 7 beschreibt im Kapitel 26 zuerst einmal die Prinzipien des Wellenmodells. Anhand von Spalten in einer Wand und mit dem Wellenmodell wird ein Bezug zu den Wahrscheinlichkeitsaussagen des Zufallsversuch am Doppelspalt mit Quantenteilchen hergestellt. Feynman findet in diesem Kapitel zweimal Erwähnung. Allerdings bleibt der Inhalt des Buches bei diesen Einleitungen stehen. Eine Erweiterung auf die Additions- und Multiplikationsregel für die zu betrachtenden Wahrscheinlichkeitsamplituden wird nicht vorgenommen. Außerdem werden keine weiteren elementaren quantentheoretische Beispiele betrachtet. Immerhin wird der Aspekt der ununterscheidbaren Wege am Doppelspalt mit einem Welcher-Weg-Detektor besprochen. Diese Ausführungen werden wieder ohne jegliche mathematischen Bezüge beschrieben [Apolin 2008]. Das Lehrwerk von Dorn/Bader basiert in Zügen auf Feynman's Buch zur Vorlesung *QED - A Strange Theory of Light and Matter*. Dabei werden an verschiedenen Stellen die Beschreibungen von quantentheoretischen Beispielen mit Hilfe des Zeigermodells graphisch dargestellt [Bader/Dorn 2007]. Es gibt Abbildungen zum Doppelspalt, zum Zerfließen eines Wellenpaktes und zur fortschreitenden Welle. Weiters gibt das Lehrbuch auch eine mathematische Formel für den Doppelspalt an, die in anderen Lehrbüchern zur Gänze fehlt, wenngleich andere Lehrbücher durchaus kompliziertere Gleichungen enthalten. Das Lehrbuch stellt damit eine gute Grundlage für die noch vorzustellenden Quantentheorie aus der Sicht Feynmans dar.
Pospiech stellt in seinem Buch einen Lehrgang über die "Moderne Quantenphysik im Unterricht" [Pospiech 2004] vor. Dieser basiert auf einer umfassenden Lehrplananalyse sowie Lerneranalyse. Dieses Frankfurter Konzept legt sich besonders darauf fest, die Diskussion des Welle-Teilchen-Dualismus zu vermeiden, um später keine Fehlvorstellungen bei den Schülern zu festigen. Der Lehrgang unterteilt sich in einen Pflicht- und Kürteil. Die drei Pflichtmodule umfassen Aspekte wie die Einführung in die Quantenwelt mit Hilfe des Lichts, den fundamentalen Strukturen der Quantentheorie der Wahrscheinlichkeit und das EPR-Experiement. Wie schon einige Lehrbücher, so basiert der Pflichtteil des Lehrganges eher auf einer philosophischen Diskussion der Quantentheorie. Erst im Kürteil ist ein deutlicher Unterschied zu vielen Lehrbüchern zu erkennen. Hier werden der Messprozess anhand des Bombentests (Störung einer Messung am Mach-Zehnder-Interferometer [Embacher 2000]) erarbeitet, die technologischen Perspektiven am Beispiel der Quantenkryptographie, der Teleportation erläutert und der Übergang zur Atomphysik mittels des Doppelspaltversuchs über die Unbestimmtheitsrelation beschrieben [Pospiech 2004].
Ähnliche Lehrgänge findet man auch als Zusammenfassung im Internet. Beispielhaft soll hier die Webseite "milq - Münchener Internetprojekt zur Lehrer-

fortbildung in Quantenmechanik" [LMU-milq 2012] vorgestellt werden. Auch wenn die Zielgruppe der Webseite Lehrer sind, soll der Inhalt der Webseite in groben Zügen vorgestellt werden. Schließlich richtet sich die Webseite "an alle, die in der Schule Quantenphysik unterrichten und sich gerne noch etwas ausführlicher damit beschäftigen wollen" [LMU-milq 2012]. Im Lehrgang erhalten die Lehrer einen Überblick zu grundlegenden Inhalten der Quantentheorie von Photonen, der Zustandspräparation über die Heisenbergsche Unschärferelation bis zum Wasserstoffatom. In Erweiterungslektionen wird wie bei Pospiech auf weitere Anwendungen eingegangen.
Es findet sich aber kein Bezug zum Ansatz von Feynman über die Betrachtung der Quantentheorie. Auf der Unterseite *Weitere Lektionen* gibt es einen Themenbereich *Unterrichtskonzepte*. Dort werden unter anderem auch Konzepte basierend auf dem Zeigerformalismus von Feynman vorgestellt. Küblbeck, Bader und Werner haben dabei recht unterschiedliche Konzepte entwickelt [Pospiech 2004, LMU-Konzepte 2012].
Das Unterrichtskonzept der Quantenmechanik nach Küblbeck (Tab. 1.1) greift als erstes bekannte Modelle aus der Physik zur Beschreibung von Prozessen der Akustik das Wellenmodell und von Vorgängen der Mechanik das Teilchenmodell auf. Über die Analogien von Licht und Elektronen wird dann ein Bogen zur Heisenbergschen Unschärferelation und den Feynmanprinzipien gespannt. Damit erfolgt die Interpretation der Quantentheorie mit dem Zeigerformalismus erst recht spät im Vergleich zu den Konzpeten nach Bader und Werner.

Anwendung des Teilchenmodells auf das Licht beim Photoeffekt	Wellen- und Teilchenmodell am Beispiel des Doppelspalts, Photoeffekt mit dem Teilchenmodell und Bestimmung des Wirkungsquantums $\hbar$
Elektronen mittels Teilchen- und Wellenmodell	Beugung von Elektronen am Spalt, Aufzeigen der Analogien zwischen Licht und Elektronen
Anwendung der Feynmanprinzipien anhand der Unschärferelation	Nach der Heisenbergschen Unschärferelation und den Feynmanprinzipien ist es nicht möglich, am Doppelspalt eine Interferenz zu beobachten, wenn der Weg der Objekte bekannt ist. Einsatz von Demonstrationsexperimenten am Doppelspalt mit veränderbaren Polarisatoren
Diskussion der Modellbildung	Das Wellen- und Teilchenmodell ist nicht ausreichend für die neue Situation, daher muss man ein neues Modell entwerfen.
Erarbeitung des Zeigerformalismus	Regeln für den Zeigerformalismus aufstellen und mit Schülerexperiment (Rad am Stiel) ausprobieren
Anwendung in der Quantenmechanik auch für gebundene Quantenobjekte	keine genauen Vorschläge von Küblbeck

Tabelle 1.1: Unterrichtskonzept nach Küblbeck [LMU-Konzepte 2012]

Baders Konzept (Tabelle 1.2) basiert von Anfang an auf dem Zeigerformalismus. Die Reihenfolge seines Konzeptes erklärt auch den Aufbau des auf dieses Konzept bezogenen Kapitels zur Quantenphysik im Lehrbuch *Physik 3* von Dorn und Bader. Ohne Umschweife über bereits behandelte Modelle wird der Zeigerformalismus von Beginn an eingeführt und mit Hilfe von Computerprogrammen

genutzt, um verschiedenste Beispiele der Quantentheorie ohne viel Mathematik und ohne Verwendung des Welle-Teilchen-Dualismus, der zuweilen bei Schülern nur für Verwirrung sorgt, zu erklären.

Zeigerformalismus in der Wellenoptik	Licht und das Fermatsche Prinzip als Grundlage zur Einfürhung des Zeigerformalismus an Beugungsbildern
Einführung der Lichtquanten	Der Zeigerformalismus liefert Wahrscheinlichkeitsaussagen für Quanten, Beispiele Photoeffekt, Röntgenbremsspektrum und Paarbildung sowie -vernichtung
Einführung von Quanten mit Ruhemasse	Superposition der Wahrscheinlichkeitsaussagen, De-Broglie Beziehung und Elektronenbeugungsröhre
Einführung von Wellenpaketen	Zusammensetzung und Zerfließen von Wellenpaketen in Zusammenhang mit der Unschärferelation
Quantisierung der Energie	über die Ergebnisse des Franck-Hertz-Versuchs zu den in Potentialtöpfen eingesperrten Elektronen und den damit verbundenen Quantensprüngen zwischen den Energieniveaus
Schrödingergleichung	wie bereits in den anderen 5 Etappen Einsatz von Computerprogrammen, hier zum Finden von Eigenwerten von vorgegebenen Potentialen, weitere Anwendungen Tunneleffekt, harmonischer Oszillator

Tabelle 1.2: Unterrichtskonzept nach Bader [LMU-Konzepte 2012]

Ein dritter Vorschlag basierend auf dem Zeigerformalismus wurde von Erb, Schön und Werner (Tabelle 1.3) vorgestellt. Dieses Konzept baut auf dem Optikcurriculum mittels Fermatschem Prinzip auf. Dieses Prinzip soll bereits in der

Mittelstufe vermittelt werden, um dann in der Oberstufe zum Feynmanschen Zeigerformalismus erweitert zu werden. Werner hat dieses Konzept in einer Studie getestet und zufriedenstellenende Kenntnisse nach dem Unterrichtsversuch bei den Schülern feststellen können. [LMU-Konzepte 2012]

Licht als Quantenobjekt	Doppelspaltexperiment mit Photonen, Photoeffekt und Bestimmung des Planckschen Wirkungsquantums $\hbar$, Interpretation des Zeigermodells unter als Wahrscheinlichkeitsaussage (Quadrat des Zeigers ist die Antreffwahrscheinlichkeit und nicht die Intensität) Interferenz nur beobachtbar, wenn es verschiedene Wege gibt, deren Auswahl unklar bleibt. Daraus leitet sich die Unbestimmtheitsrelation ab.
Elektronen als Quantenobjekte	Zeigerformalismus für Elektronen einführen, dazu De-Broglie-Beziehung bekannt machen
Gebundene Zustände von Quantenobjekten	Darstellung des unendlich hohen Potentialtopfs mit dem Zeigerformalismus, Ableitung des quantenmechanischen Atommodells aus eindimensionalen, weil rotationssymetrischen Elektronenverteilung im Atom, Verstehen von Spektren und Spektrallinien

Tabelle 1.3: Unterrichtskonzept nach Werner [LMU-Konzepte 2012]

In den weiteren Kapiteln der vorliegenden Diplomarbeit werden die gleichen Beispiele der Quantentheorie durch konventionelle Betrachtungen und nach Feynmans Methode gelöst, bevor abschließend beurteilt wird, um eine Grundlage für die Bewertung der Animationen zu haben.

2 Grundlagen der Quantentheorie

2.1 Klassische Mechanik

Für die Beschreibung der Bewegung eines Teilchens werden in der klassischen Mechanik der Ort $\vec{r} = (x, y, z)$ und die Geschwindigkeit $\vec{v} = (\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$ verwendet [Cohen-Tannoudji 2007, Neufeld 2012].
Im allgemeinen Fall eines Systems mit f Freiheitsgraden wird die Lage des Systems durch f verallgemeinerte Koordinaten $q = (q_1, ..., q_f)$ beschrieben. Die Dynamik eines Systems wird mit dem Prinzip der kleinsten Wirkung (Anhang A) beschrieben. Dieses Prinzip besagt, dass es zu jedem physikalischen System eine Lagrangefunktion $\mathcal{L}\big(q, \dot{q}, t\big)$ gibt und der Verlauf der Bewegung des Systems so verläuft, dass das Wirkungsintegral [Reineker 2008]

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt\, \mathcal{L}\big(q, \dot{q}, t\big) \tag{2.1}$$

für die tatsächliche Bewegung ein Extremum wird. Daraus folgen die Euler-Lagrangeschen Bewegungsgleichungen

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} \qquad i = 1, ..., f\,. \tag{2.2}$$

Die Gleichungen (2.2) sind f gewöhnliche Differentialgleichungen zweiter Ordnung.
Eine alternative Formulierung der klassischen Mechanik ist der Hamiltonformalismus. Hier braucht man den kanonisch konjugierten Impuls

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}\big(q, \dot{q}, t\big)}{\partial \dot{q}_i} \qquad i = 1, ..., f \tag{2.3}$$

sowie die Hamiltonfunktion

$$H(q, p, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}(q, \dot{q}, t)\,, \tag{2.4}$$

aus der man die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen herleiten kann

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}\,, \tag{2.5}$$

also $2f$ gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung. Die generalisierten Koordinaten und die konjugierten Impulse spannen den sogenannten Phasenraum auf, in dem beobachtbare Größen, auch Observable genannt, mittels reellwertiger Funktionen

$$A(q_1 ... q_f, p_1 ... p_f) \tag{2.6}$$

beschrieben werden. Die Menge aller dieser Funktionen bildet die Observablenalgebra. Im Hamilton-Formalismus kann ein mechanisches System, das f Freiheitsgrade enthält, mit den folgenden fünf Grundprinzipien in der klassischen Mechanik beschrieben werden [Cohen-Tannoudji 2007].

Grundprinzip 1 Einer Observablen $\mathcal{A}$ wird eine reellwertige Funktion auf dem Phasenraum zugeordnet.

Grundprinzip 2 Möglicher Messwert a_n einer Observablen $\mathcal{A}$ ist ein Element aus dem Wertebereich der reellwertigen Funktion, die die Observable repräsentiert.

Grundprinzip 3 Als reiner Zustand ist ein Punkt im Phasenraum zu verstehen. Ein gemischter Zustand wird durch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $\rho(q, p)$ im Phasenraum bestimmt und hat folgende Eigenschaften

$$\rho(q, p) \geq 0 \,\text{und}\, \int dq\, dp\, \rho(q, p) = 1\,. \tag{2.7}$$

Der reine Zustand als Grenzfall ist das Produkt aus δ-Funktionen

$$\rho(q, p) = \delta(q - q_0)\delta(p - p_0) \tag{2.8}$$

Grundprinzip 4 Der Erwartungswert $\langle A \rangle$ einer Observablen wird durch

$$\langle A \rangle = \int dp\, dq\, \rho(q, p) A(q, p) \tag{2.9}$$

bestimmt. Es wird jeder Observablen $\mathcal{A}$ ein Erwartungswert $\langle A \rangle$, der eine reelle Zahl ist, zu geordnet. Dabei hat die Zuordnung $A \to \langle A \rangle$ folgende Eigenschaften

- die Linearität $\langle c_1 A_1 + c_2 A_2 \rangle = c_1 \langle A_1 \rangle + c_2 \langle A_2 \rangle$ mit $c_{1,2} \in \mathbb{R}$ und $A_{1,2}$ Observablen,
- die Nichtnegativität $\langle A^2 \rangle \geq 0 \qquad \forall A$ und
- die Normierung $\langle 1 \rangle = 1$.

Damit ist ein Zustand allgemein gesprochen ein lineares, nicht negatives und normiertes Funktional auf der Observablenalgebra.

Grundprinzip 5 In der klassischen Mechanik kann die Zeitentwicklung eines System durch Anwendung der Hamilton-Gleichungen

$$\frac{d\,q_i}{d\,t} = \frac{\partial \mathcal{H}\big(q_i, p_i, t\big)}{\partial p_i}, \quad \frac{d\,p_i}{d\,t} = -\frac{\partial \mathcal{H}\big(q_i, p_i, t\big)}{\partial q_i} \tag{2.10}$$

bestimmt werden.

2.2 Quantentheorie aus konventioneller Sicht

In der Quantentheorie eines spinlosen und nichtrelativistischen Teilchens bildet der Funktionenraum der komplexwertigen, quadratintegrablen Funktionen

$$L^2(\mathbb{R}^3) = \Big\{\psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C} \Big| \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi(\vec{x})|^2 < \infty\Big\} \tag{2.11}$$

den geeigneten mathematischen Rahmen [Cohen-Tannoudji 2007, Schwabl 2007, Reineker 2008]. Die Wellenfunktionen sind Elemente ψ von $L^2(\mathbb{R}^3)$, die die Normierungsbedinung

$$\int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x |\psi(\vec{x})|^2 = 1 \tag{2.12}$$

erfüllen. Es handelt sich um einen Vektorraum über $\mathbb{C}$, in dem das Skalarprodukt

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int\limits_{\mathbb{R}^3} d^3x \phi(\vec{x})^* \psi(\vec{x}), \qquad \phi(\vec{x})\,\psi(\vec{x}) \in L^2(\mathbb{R}^3) \tag{2.13}$$

definiert werden kann, das folgende Eigenschaften

- Linearität $\langle \psi |\, a_1\phi_1 + a_2\phi_2 \rangle = a_1 \langle \psi | \phi_1 \rangle + a_1 \langle \psi | \phi_1 \rangle$,

- $\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*$ und
- $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \quad \langle\psi|\psi\rangle = 0 \iff \psi = 0$

hat. Dieser Funktionenraum ist ein Beispiel für einen Hilbert-Raum $\mathcal{H}$.
Mit Hilfe dieses mathematischen Rahmens lassen sich die allgemeinen Grundprinzipien der Quantentheorie für beliebige Systeme formulieren [Schwabl 2007, Basdevant 2002, Cohen-Tannoudji 2007]. Dieser Rahmen erlaubt unter anderem auch die Behandlung von Mehrteilchensystemen und Teilchen mit Spin.

Grundprinzip 1 Jede messbare physikalische Größe oder Observable $\mathcal{A}$ wird durch einen im Zustandsraum $\mathcal{H}$ wirkenden hermiteschen Operator A beschrieben. Ein wesentlicher Unterschied zur klassischen Mechanik liegt in der nicht kommutativen Observablenalgebra, d.h. es gibt Operatoren mit der Eigenschaft

$$[A, B] = AB - BA \neq 0\,. \tag{2.14}$$

Grundprinzip 2 Messwert einer physikalischen Größe $\mathcal{A}$ kann nur einer der Eigenwerte a_n des zugehörigen Operators A sein, d.h. bei einer Messung der Observable $\mathcal{A}$ sind nur Eigenwerte a_n des Operators A möglich.

Grundprinzip 3 Lineare Funktionale auf der Observablenalgebra beschreiben mögliche Zustände eines Systems. Weiterhin sind diese Funktionale wie auch in der klassischen Mechanik außerdem nicht negativ und normiert.

Grundprinzip 4 Der Erwartungswert eines Operators A für einen beliebigen Zustand wird mit dem Dichteoperator

$$\rho = \sum_{k=1}^{n} \rho_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \tag{2.15}$$

bestimmt, der folgende Eigenschaften hat

$$\rho_k \geq 0,\ \mathrm{Tr}\rho = \sum_{k=1}^{n} \rho_k = 1\,. \tag{2.16}$$

Der Dichteoperator liefert die Standardform für die Darstellung eines beliebigen Zustandes ω mit $\omega(A) = \mathrm{Tr}(\rho A)$.[1]

[1] Für eine Messung kann man auf Grund des Wesens des Eigenwertspektrums des Operators A verschiedene Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten von Eigenwerten a_n angeben (Anhang B).

Für einen reinen Zustand hat der Dichteoperator die Form $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ und vereinfacht den Erwartungswert eines Operators A auf

$$\omega(A) = \langle\psi|A\psi\rangle\,. \tag{2.17}$$

Grundprinzip 5 Der Zustandsvektor $|\psi(t)\rangle$ wird durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar\frac{d}{d\,t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle \tag{2.18}$$

mit der dem System als Observable zugeordneten zeitabhängigen Gesamtenergie $H(t)$ zeitlich entwickelt. Mit der aus dem allgemeinen Dichteoperator

$$\rho_S(t) = \exp(-iHt/\hbar)\rho_S(0)\exp(-iHt/\hbar) \tag{2.19}$$

gewonnenen von-Neumann-Gleichung

$$i\hbar\frac{d\rho_S(t)}{dt} = [H, \rho_S(t)] \tag{2.20}$$

kann man auch Zeitentwicklungen für gemischte Zustände mit zeitabhängigem Hamiltonoperator durchführen.
Am Beispiel des Streuversuchs wird ein weiterer wesentlicher Unterschied der Quantentheorie im Vergleich zur klassischen Mechanik erläutert. In der Quantentheorie ist es nicht wie in der klassischen Mechanik möglich vorherzusagen, welcher Detektor bei welchen gleich präparierten Quantenobjekt anspricht. Jedoch kann man das Ergebnis bei der Wiederholung des gesamten Versuchs mit den gleich präparierten Quantenobjekten vorhersagen.

2.3 Die Feynmansche Sicht der Quantentheorie

Der Feynmansche Zugang zur Quantentheorie ist ein anderer, beschreibt aber die gleichen physikalischen Vorgänge. Die Grundprinzipien der Quantentheorie illustriert Feynman mit Hilfe des Doppelspaltexperiments. Dabei ergeben sich für Feynman vier Grundprinzipien [Feynman 2006, Feynman 2010].

Grundprinzip 1 Die Wahrscheinlichkeit $\mathcal{P}$ eines Ereignisses

$$\mathcal{P} = |\phi|^2 \tag{2.21}$$

in einem idealen Experiment entspricht dem Absolutquadrat einer komplexen Wahrscheinlichkeitsamplitude ϕ.

Grundprinzip 2 Wenn ein Ereignis auf verschiedenen Wegen zustande kommt, so werden die Wahrscheinlichkeitsamplituden ϕ_n jedes Weges zur Gesamtwahrscheinlichkeitsamplitude für dieses Ereignis addiert. Die Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses ergibt sich dann aus dem Quadrat der Summe der Einzelwahrscheinlichkeitsamplituden

$$\mathcal{P} = |\phi_1 + \phi_2 + ... + \phi_n|^2 . \tag{2.22}$$

Grundprinzip 3 Wenn mit dem Experiment festgestellt werden kann, auf welchem Weg ein Ereignis eingetreten ist, dann ergibt sich die Wahrscheinlichkeit des Ereignisses aus

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}_1 + \mathcal{P}_2 + ... + \mathcal{P}_n , \tag{2.23}$$

d.h. die Interferenz geht verloren.

Grundprinzip 4 Wenn man einen Weg, der zu einem Ereignis führt, in Teilabschnitte zerlegen kann, dann ergibt sich die Wahrscheinlichkeit für diesen Weg aus

$$\mathcal{P} = |\phi_1 \cdot \phi_2 \cdot ... \cdot \phi_n|^2 , \tag{2.24}$$

also dem Produkt der Wahrscheinlichkeitsamplituden ϕ_n.
Sowohl die konventionelle Betrachtung der Quantentheorie als auch die Feynmansche Sicht beschreiben die gleichen Beobachtungen, d.h. sie sind äquivalente Ansätze. In den folgenden zwei Kapiteln soll dies anhand einiger Beispiele gezeigt werden. Dabei gilt es zu zeigen, dass die Feynmansche Sicht Vorteile für das Verständnis der Quantenmechanik bietet, die sich auch in der Schule ohne weiteres umsetzen lassen, wenn man sich auf die beschriebenen Grundsätze der Feynmanschen Sicht beschränkt und nicht versucht die Amplituden für die verschiedenen Beispiele zu bestimmen.

3 Konventionelle Betrachtung ausgewählter quantentheoretischer Beispiele

3.1 Wechselwirkung mit einem Dirac-Potential

Als erstes Beispiel für die konventielle Betrachtung von einfachen quantentheoretischen Vorgängen wird der Fall eines Teilchens diskutiert, das mit einem Potential [Cohen-Tannoudji 2007]

$$V(x) = \lambda \cdot \delta(x) \qquad \text{mit } \lambda > 0 \tag{3.1}$$

wechselwirkt, wobei der Koeffizient λ ein Maß für die Stärke des Potentials ist. Das Dirac-Potential hat folgende Eigenschaften [Reineker 2008]:

$$\begin{aligned}
\delta(x) &= \delta(-x) && \text{Symmetrieeigenschaft,}\\
f(x)\delta(x) &= f(0)\delta(x) && \text{Vereinfachungsregel im Produkt mit einer Funktion,}\\
\Theta'(x) &= \delta(x) && \text{Ableitung der Sprungfunktion und}\\
\Theta'(-x) &= -\delta(-x) = -\delta(x) && \text{Ableitung der Sprungfunktion für } x < 0\,.
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Aus den Eigenschaften eines solchen Potentials sieht man, dass dieses Potential die Ableitung der Sprungfunktion ist. Wenn die Sprungfunktion etwas verschmiert ist und nicht schön rechteckig, dann ist die Ableitung eine Deltafolge, die durch den Koeffizienten verändert wird. Der Hamiltonoperator enthält die kinetischen Energie des Teilchens und die potentielle Energie der Wechselwirkung [Cohen-Tannoudji 2007, Reineker 2008],

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \lambda\delta(x). \tag{3.3}$$

Damit hat das Eigenwertproblem für das Beispiel der Wechselwirkung eines Teilchens mit einem Dirac-Potential die folgende Form:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \lambda\delta(x)\right]\psi(x) = E\psi(x). \tag{3.4}$$

Als Lösungsansatz kann man eine Wellenfunktion verwenden, die mit Hilfe der Sprungfunktion in zwei Bereiche folgendermaßen

$$\psi_k(x) = \left(e^{ikx} + Re^{-ikx}\right)\Theta(-x) + Te^{ikx}\Theta(x) \tag{3.5}$$

eingeteilt ist. An der Schnittstelle, die mit Hilfe zweier Sprungfunktionen in Gleichung (3.5) beschrieben ist, muss die Funktion $\psi_k(x)$ stetig sein, damit in der zweiten Ableitung eine Dirac-Distribution $\psi_k''(x) \approx \delta(x) + ...$ entsteht. Die Sprungfunktionen $\Theta(x)$ und $\Theta(-x)$ haben ihren Sprung an der Stelle $x = 0$. All das drückt sich in den folgenden Zusammenhängen aus:

$$\begin{aligned} 1 + R(k) &= T(k) \\ \psi_k'(x) &= ik\Big(e^{ikx} - Re^{-ikx}\Big)\Theta(-x) + ikTe^{ikx}\Theta(x) \\ \psi_k''(x) &= -k^2\psi_k + 2ik\Big(Te^{ikx} - 1\Big)\delta(x)\,, \end{aligned} \tag{3.6}$$

wobei die Herleitung der zweiten Ableitung im Anhang C enthalten ist. Damit erhält man folgende Zusammenhänge für das Eigenwertproblem:

$$\begin{aligned} &E\psi_k(x) = H\psi_k(x) \\ &\quad \text{mit (3.3) ergibt sich} \\ &E\psi_k(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_k''(x) + \lambda\delta(x)\psi_k(0) \\ &E\psi_k(x) = E\psi_k(x) \underbrace{-i\frac{\hbar^2 k}{m}\Big(T(k) - 1\Big)\delta(x) + \lambda\delta(x)\psi_k(0)}_{=0 \qquad \text{für die Erfüllung der Gleichung}}\,. \end{aligned} \tag{3.7}$$

Mit den Eigenschaften der Delta-Distribution (3.2) kann man nun den Transmissionskoeffizienten bestimmen. Damit kann man auch den Reflexionskoeffizienten aus $1 = T(k) + R(k)$ berechnen (Anhang C). Insgesamt erhält man die folgende Lösung:

$$\begin{aligned} T(k) &= \frac{1}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}} \\ R(k) &= -\frac{i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}\,. \end{aligned} \tag{3.8}$$

3.1.1 Diskussion der Reflexions- und Transmissionskoeffizienten

Zuerst werden Grenzfälle für die Transmissionsamplitude $T(k)$ diskutiert. Dazu werden abwechelnd die Wellenzahl k, die Masse m und die Stärke des Diracpotentials λ variiert. Bei der Grenzwertbetrachtung der Wellenzahl gegen Unendlich ergibt sich

$$\lim_{k\to\infty} T(k) = \lim_{k\to\infty} \frac{1}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}} = 1 \tag{3.9}$$

und man kann folgende Aussage daraus ableiten: Je größer die Wellenzahl k und damit der Impuls $p = \hbar k$ eines Teilchens, desto größer ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude $T(k)$. Physikalisch bedeutet dies, dass das Teilchen durch die Barriere treten kann. Wenn man die Wellenzahl gegen Null streben lässt, dann erhält man folgenden Zusammenhang

$$\lim_{k\to 0} T(k) = \lim_{k\to 0} \frac{1}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}} = 0, \tag{3.10}$$

der im Umkehrschluss für ein Teilchen mit wenig Energie also einer Wellenzahl k gegen Null bedeutet, dass es für dieses Teilchen sehr unwahrscheinlich ist, das Dirac-Potential zu durchtunneln. Führt man die Gedanken der Grenzwertbetrachtung für die Masse durch, kann man zuerst diese Situation betrachten

$$\lim_{m\to \infty} T(k) = \lim_{m\to \infty} \frac{1}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}} = 0. \tag{3.11}$$

Wenn die Masse m eines Teilchens unendlich ist, aber der Impuls p des Teilchens wegen $p = \hbar\, k$ konstant gehalten werden soll, dann muss bei unendlich großer Masse die Geschwindigkeit des Teilchens unendlich klein sein. Damit ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude $T(k)$ für die Transmission Null. Ein unendlich schweres Teilchen bewegt sich also so langsam, dass es nicht durch das Dirac-Potential hindurch treten kann. Die Betrachtung des Grenzwertes der Masse gegen Null führt mathematisch zu folgendem Ergebnis

$$\lim_{m\to 0} T(k) = \lim_{m\to 0} \frac{1}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}} = 1, \tag{3.12}$$

aber diese Überlegung wird nicht weiter verfolgt, weil sie in der nichtrelativistischen Physik nicht mehr anwendbar ist. Damit folgen nun noch die Grenzwertbetrachtungen für die Stärke des Potentials, wobei sich zum einen

$$\lim_{\lambda\to \infty} T(k) = \lim_{\lambda\to \infty} \frac{1}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}} = 0 \tag{3.13}$$

ergibt, weshalb man sagen kann, je stärker das Dirac-Potential ist, desto unwahrscheinlicher ist es, dass ein Teilchen mit gleichem Impuls p und gleicher Masse m die Barriere überwinden kann. Für anderen Fall ergibt sich

$$\lim_{\lambda\to 0} T(k) = \lim_{\lambda\to} \frac{1}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}} = 1 \tag{3.14}$$

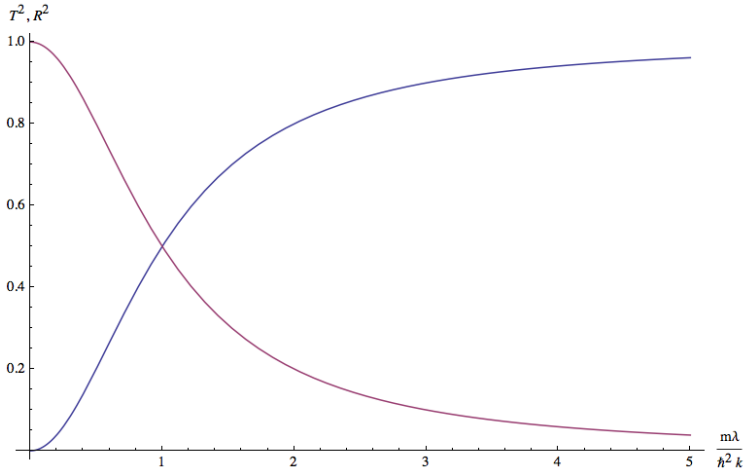


Abbildung 3.1: Darstellung der Transmissions- (blau) und der Reflexionswahrscheinlichkeit (violett) in Abhängigkeit von $\frac{m\,\lambda}{\hbar^2\,k}$

als Ergebnis aus der Grenzwertbetrachtung. Im letzten diskutierten Fall wurde die Stärke des Dirac-Potentials so weit reduziert, dass es kein Potential mehr gibt. Dies bedeutet, dass das Teilchen keine Wechselwirkung mit dem Potential eingeht und damit mit absoluter Sicherheit durch die Barriere geht.
Die folgende Beziehung zeigt das Verhalten der Reflexionsamplitude zur Transmissionsamplitude

$$1 = R(k)^2 + T(k)^2, \tag{3.15}$$

weshalb es nicht notwendig ist, die Betrachtungen für die Reflexionsamplitude zu wiederholen.
In der Abbildung (3.1) ist die Beziehung (3.15) dargestellt. Mit steigendem Term $m\,\lambda/\hbar^2\,k$ zum Beispiel durch ein stärkeres Dirac-Potential nimmt die Transmissionswahrscheinlichkeit T^2 ab und die Reflexionswahrscheinlichkeit R^2 zu, so dass deren Summe immer eins ist.

3.2 Wechselwirkung mit zwei Dirac-Potentialen

Die Situation wird in drei Teilbereiche eingeteilt. Teil 1 erstreckt sich von $-\infty < x < 0$, während Teil 2 von $0 \leq x \leq a$ reicht. Der Teil 3 enthält alle Wert für $x > a$.

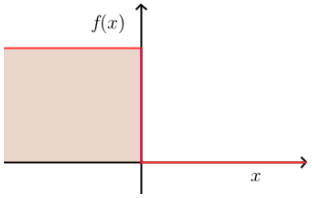
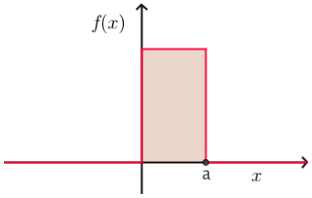
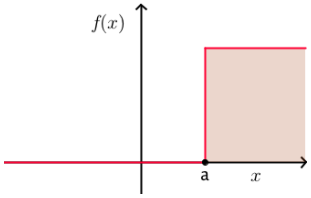
Teil 1	Teil 2	Teil 3
$-\infty < x < 0$	$0 \leq x \leq a$	$a < x < \infty$
Sprungfunktion	Sprungfunktion	Sprungfunktion
$\Theta(-x)$	$\Theta(x)\Theta(a-x)$	$\Theta(x-a)$
		

Abbildung 3.2: Einteilung der Sprungfunktionen für einen Lösungsansatz

Mit Hilfe der Informationen aus Abbildung (3.2) kann man nun einen Lösungsansatz aufstellen. Dabei werden wie schon im Fall der Wechselwirkung mit einem Dirac-Potential Koeffizienten eingesetzt, die physikalisch von Bedeutung sind. Im ersten Teil wird es eine Reflexionsamplitude $R(k)$ und im letzten Abschnitt eine Transmissionsamplitude $T(k)$ geben. Somit erhält man

$$\begin{aligned}\psi_k(x) =& \left(e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}\right)\Theta(-x) \\ &+ \left(A(k)e^{ikx} + B(k)e^{-ikx}\right)\Theta(x)\Theta(a-x) \\ &+ T(k)e^{ikx}\Theta(x-a)\end{aligned} \tag{3.16}$$

als Ansatz für die Wellenfunktion. Die Koeffizienten im zweiten Abschnitt werden nicht weiter betrachtet, weil sie keinen Einfluss auf die Transmissions- und Refelxionsamplitude haben. Der Hamiltonoperator für diesen Fall lautet

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \lambda_1\delta(x) + \lambda_2\delta(x-a). \tag{3.17}$$

Um das Eigenwertproblem zu bearbeiten und die Lösungen der Koeffizienten zu bestimmen, werden die Stetigkeitsbedingungen für die Stellen $x = 0$ und $x = a$, sowie die erste und zweite Ableitung des Lösungsansatzes (Anhang D)

aufgestellt und es folgt

$$\begin{aligned}
1 + R(k) =& A(k) + B(k) \\
A(k)e^{ika} + B(k)e^{-ika} =& T(k)e^{ika} \\
\psi_k'(x) =& ik\Big(e^{ikx} - R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) \\
&+ ik\Big(A(k)e^{ikx} - B(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(x)\Theta(a-x) \\
&+ ikT(k)e^{ikx}\Theta(x-a) \\
\psi_k''(x) =& -k^2\psi(x) + ik2\Big(A(k) - 1\Big)\delta(x) + ik2B(k)e^{-ika}\delta(x-a)\,.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Nun wird das Eigenwertproblem unter Verwendung des Hamiltonoperators für zwei Dirac-Potentiale, der zweiten Ableitung des Lösungsansatzes und dem Lösungsansatz aufgestellt, der dann

$$\begin{aligned}
E\psi_k(x) =& H\psi_k(x) \\
E\psi_k(x) =& -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_k''(x) + \lambda_1\delta(x)\psi_k(0) + \lambda_2\delta(x-a)\psi_k(a) \\
E\psi_k(x) =& E\psi_k(x) \\
&\underbrace{-i\frac{\hbar^2 k}{m}2\Big(A(k) - 1\Big)\delta(x) + \lambda_1\delta(x)\psi_k(0)}_{=0 \quad \text{für die Erfüllung der Gleichung}} \\
&\underbrace{-i\frac{\hbar^2 k}{m}2B(k)\delta(x-a) + \lambda_2\delta(x-a)\psi_k(a)}_{=0 \quad \text{für die Erfüllung der Gleichung}}
\end{aligned} \tag{3.19}$$

lautet. Mit den Bedingungen aus (3.19) und für die Stetigkeit des Lösungsansatzes an den beiden Dirac-Potentialen erhält man

$$\begin{aligned}
1 + R(k) &= A(k) + B(k) \\
A(k)e^{ika} + B(k)e^{-ika} &= T(k)e^{ika} \\
i\frac{\hbar^2 k}{m}2\Big(A(k) - 1\Big) &= \lambda_1\Big(A(k) + B(k)\Big) \\
i\frac{\hbar^2 k}{m}2B(k) &= \lambda_2\Big(A(k)e^{ika} + B(k)e^{-ika}\Big),
\end{aligned} \tag{3.20}$$

d.h. es ergeben sich vier von einander unabhängige Gleichungen. Dieses Gleichungssystem kann man mit einer Algebrasoftware lösen und erhält für die

Reflexionsamplitude $R(k)$ und die Transmissionsamplitude $T(k)$ die folgenden Ausdrücke:

$$R = -\frac{i\left(\frac{\lambda_1 m}{\hbar^2 k} + \frac{\lambda_2 m}{\hbar^2 k} e^{i2ka}\right) + \frac{\lambda_1 \lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}\left(e^{i2ka} - 1\right)}{1 + i\left(\frac{\lambda_1 m}{\hbar^2 k} + \frac{\lambda_2 m}{\hbar^2 k}\right) + \frac{\lambda_1 \lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}\left(e^{i2ka} - 1\right)}$$
$$T = \frac{1}{1 + i\left(\frac{\lambda_1 m}{\hbar^2 k} + \frac{\lambda_2 m}{\hbar^2 k}\right) + \frac{\lambda_1 \lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}\left(e^{i2ka} - 1\right)}. \tag{3.21}$$

Zum Vergleich mit den Reflexions- und Transmissionsamplituden bei einer Wechselwirkung mit einem Dirac-Potential wird der Abstand a gleich Null gesetzt. Damit ergeben sich folgende Amplituden:

$$R = -\frac{i\frac{\left(\lambda_1+\lambda_2\right) m}{\hbar^2 k}}{1 + i\frac{\left(\lambda_1+\lambda_2\right) m}{\hbar^2 k}}$$
$$T = \frac{1}{1 + i\frac{\left(\lambda_1+\lambda_2\right) m}{\hbar^2 k}}. \tag{3.22}$$

Damit steht das gefundene Ergebnis im Einklang mit den Amplituden in (3.8).

3.3 Wechselwirkung mit einer Potentialbarriere

Als weiteres Beispiel der konventionellen Betrachtung der Wechselwirkung von Teilchen wird als Potential die Potentialbarriere angenommen. Dies ist ein weiteres Beispiel, das nur in einer Dimension betrachtet werden soll. Der Hamiltonoperator für die Potentialbarriere mit dem Potential $V > 0$ zwischen den Koordinaten $0 \leq x \leq a$ lautet folgendermaßen [Cohen-Tannoudji 2007, Basdevant 2002, Reineker 2008]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\,\Theta(x)\Theta(a-x)\,, \tag{3.23}$$

wobei die Sprungfunktionen die beiden Flanken der Barriere für $x = 0$ und $x = a$ festlegen. Daraus ergibt sich als Lösungsansatz $\psi(x)$

$$\psi(x) = \left(e^{ikx} + Re^{-ikx}\right)\Theta(-x) + \left(Be^{i\kappa x} + Ce^{-i\kappa x}\right)\Theta(x)\Theta(a-x)$$
$$+ Te^{ikx}\Theta(x-a) \tag{3.24}$$

für das Eigenwertproblem. An den Übergangsstellen $x = 0$ und $x = a$ müssen die Funktion und deren erste Ableitung stetig sein, damit in der zweiten Ableitung Sprungfunktionen $\Theta(x)$ zur späteren Vereinfachung der Rechnung entstehen. Die erste Ableitung für den Lösungsansatz lautet

$$\begin{aligned}\psi'(x) = {} & ik\Big(e^{ikx} - Re^{-ikx}\Big)\Theta(-x) + i\kappa\Big(Be^{i\kappa x} - Ce^{-i\kappa x}\Big)\Theta(x)\Theta(a-x) \\ & + ikTe^{ikx}\Theta(x-a)\,, \end{aligned} \tag{3.25}$$

damit können alle Terme weiter abgeleitet werden. Für die Behandlung des Eigenwertproblems ist die zweite Ableitung der Wellenfunktion $\psi(x)$

$$\begin{aligned}\psi''(x) = {} & -k^2\Big(e^{ikx} + Re^{-ikx}\Big)\Theta(-x) - \kappa^2\Big(Be^{i\kappa x} + Ce^{-i\kappa x}\Big)\Theta(x)\Theta(a-x) \\ & - k^2Te^{ikx}\Theta(x-a) \\ & + ik(1-R)\delta(x) + i\kappa\Big(B-C\Big)\delta(x) \\ & - i\kappa\Big(Be^{i\kappa a} + Ce^{-i\kappa a}\Big)\delta(a-x) + ikTe^{ika}\delta(a-x) \end{aligned} \tag{3.26}$$

zu bestimmen. Nun kann das Eigenwertproblem für $V > 0$ aufgestellt und berechnet werden

$$\begin{aligned} E\psi(x) &= H\psi(x) \\ E\psi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V\Theta(x)\Theta(a-x)\psi(a) \\ E\psi(x) &= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Bigg[- k^2\Big(e^{ikx} - Re^{-ikx}\Big)\Theta(-x)}_{=E\psi(x)} \\ &\quad \underbrace{-\kappa^2\Big(Be^{i\kappa x} + Ce^{-i\kappa x}\Big)\Theta(x)\Theta(a-x) - k^2Te^{ikx}\Theta(x-a)\Bigg]}_{=E\psi(x)} \\ &\quad \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Big[ik(1-R)\delta(x) + i\kappa\Big(B-C\Big)\delta(x)\Big] + V\Theta(x)\Theta(a-x)}_{\text{muss Null werden}} \\ &\quad \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Bigg[- i\kappa\Big(Be^{i\kappa a} + Ce^{-i\kappa a}\Big)\delta(a-x) + ikTe^{ika}\delta(a-x)\Bigg]}_{\text{muss Null werden}}\,, \end{aligned} \tag{3.27}$$

dabei zeigt sich, welche Terme verschwinden müssen, damit das Eigenwertproblem lösbar wird. Es ergeben sich die erforderlichen Anknüpfungsbedingungen

an den Stellen $x = 0$ und $x = a$

$$\begin{aligned} 1 + R &= B + C \\ ik(1 - R) &= iq(B - C) \\ Be^{iqa} + Ce^{-iqa} &= Te^{ika} \\ iq(Be^{iqa} - Ce^{-iqa}) &= ikTe^{ika}\,, \end{aligned} \tag{3.28}$$

die als Grundlage der Bestimmung der Amplituden dienen. Mittels der Anküpfungsbedingungen kann man nun die Amplituden für die Reflexion und Transmission eines Teilchens an einer Potentialbarriere mit dem Potential V und im Bereich $0 \leq x \leq a$ bestimmen

$$\begin{aligned} R &= \frac{(k^2 - q^2)(1 - e^{i2qa})}{k^2 - k^2 e^{i2qa} + 2kq + q^2 - q^2 e^{i2qa} + 2kqe^{i2qa}} \\ T &= \frac{4kqe^{i2qa}e^{-ika}}{k^2 - k^2 e^{i2qa} + 2kq + q^2 - q^2 e^{i2qa} + 2kqe^{i2qa}}\,, \end{aligned} \tag{3.29}$$

die ausführliche Rechnung befindet sich in Anhang E. In dieser Darstellung kann man die Gleichung nur schwer interpretieren. Daher werden einige Umformungen vorgenommen

$$\begin{aligned} R &= \frac{i\left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)\sin qa}{i\left(\frac{k}{q} + \frac{q}{k}\right)\sin qa - 2\cos qa} \\ T &= \frac{-2e^{-ika}}{i\left(\frac{k}{q} + \frac{q}{k}\right)\sin qa - 2\cos qa}\,, \end{aligned} \tag{3.30}$$

um dann die Gleichungen für die Reflexions- und Transmissionsamplitude verständlich in eine Reihe zu entwickeln. Die in (3.30) enthaltenen Koeffizienten entsprechen folgenden Zusammenhängen

$$\begin{aligned} a &= \text{Breite der Potentialbarriere} \\ k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ q &= \sqrt{k^2 - \frac{2mV}{\hbar^2}}\,. \end{aligned} \tag{3.31}$$

Zur Kontrolle wird das Potential V Null gesetzt, daraus ergibt sich, dass die Koeffizienten k und q gleich groß sind. In diesem Fall muss die Reflexionsamplitude Null werden,

$$R = \frac{i\left(\frac{k}{k} - \frac{k}{k}\right)\sin ka}{i\left(\frac{k}{k} + \frac{k}{k}\right)\sin ka - 2\cos ka} = 0$$
$$T = \frac{-2e^{-ika}}{i\left(\frac{k}{k} + \frac{k}{k}\right)\sin ka - 2\cos ka} = 1 \tag{3.32}$$

denn ohne Potential gibt es keine Streuung, während die Transmissionsamplitude Eins werden muss. Im Anhang E wird auch im Detail gezeigt, dass $1 = |T|^2 + |R|^2$ für die gefundenen Amplituden der Reflexion R und der Transmission T eines Teilchens in Wechselwirkung an einer Potentialbarriere der Breite a erfüllt ist.

3.4 Die Rutherfordstreuung

Im Experiment nach Rutherford wird eine Goldfolie mit α-Teilchen beschossen. Dabei wird angenommen, dass das die Mehrfachstreuung eines α-Teilchen bei einer dünnen Goldfolie nur einen kleinen Beitrag hat und somit vernachlässigt werden kann. Damit kann die Streuung der α-Teilchen mit einer einzigen Wechselwirkung angenähert werden. Die Ungenauigkeit ist beim Abbrechen mit der Doppelstreuung bereits von der Größenordnung der Feinstrukturkkonstante $\alpha \approx 137^{-1}$. Zwischen den beiden punktförmigen Körpern wird nur die elektrostatische Wechselwirkung berücksichtigt, weil die Wechselwirkung durch die Gravitation sehr viel kleiner ist. Für die Streuung muss nur die Ladung des Kerns (aber nicht die der Elektronen in der Hülle) und des gestreuten Teilchens berücksichtigt werden. Insgesamt kann man also die am Goldkern erfolgende Streuung des α-Teilchens als Zwei-Körperproblem auffassen [Basdevant 2002, Cohen-Tannoudji 2007, Fließbach 2008]

$$H = \frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2M_1} + \frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2M_2} + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)\,. \tag{3.33}$$

Dabei sind $\vec{p}_n$ der Impuls und M_n die Masse eines der beiden Teilchen. Das Potential zwischen den beiden Teilchen ist abhängig vom Abstand $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$

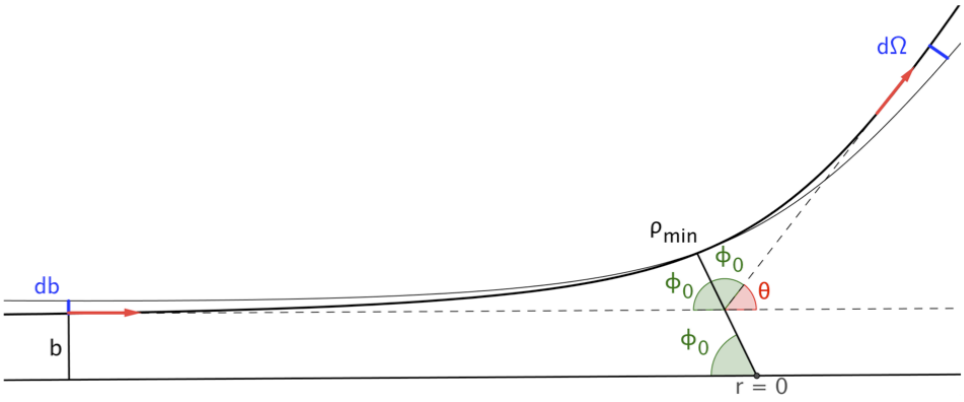


Abbildung 3.3: Streuung eines Teilchens an einem Streuzentrum bei r = 0

der beiden Stoßpartner zueinander. Der Goldatomkern und der Heliumkern (α-Teilchen) können für diese Streuprozesse als sphärische Potentiale angenähert werden, d.h. das elektrische Feld um den positiv geladenen Goldkern kann als Coulombfeld unter Vernachlässigung der auf sehr kleine Abstände wirkenden starken Wechselwirkung angenommen werden. Mit der Einführung der reduzierten Masse

$$m = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \tag{3.34}$$

kann man die Translationsbewegung abspalten und sich auf die Relativbewegung mit der verbleibenden Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned} H &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(r) \\ U(r) &= \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \end{aligned} \tag{3.35}$$

konzentrieren, wobei Z_n die Kernladungszahlen der beiden Kerne sind. Zunächst erfolgt die Berechnung mit Hilfe der klassischen Mechanik, dazu wurde gezeigt, wie sich das Problem auf die Relativbewegung eines Teilchens im äußeren Feld vereinfacht. Klassisch betrachtet man den Wirkungsquerschnitt des einfallenden und gestreuten Teilchenstromes unter der Verwendung der Energieverteilung in Abhängigkeit vom Raumwinkel. Die Anzahl der einfliegenden Teilchen dn, die dann in den Raumwinkel $d\Omega$ gestreut werden können, ergibt

sich aus dem Wirkungsquerschnitt der Bahn und der Stromdichte F der einfliegenden Teilchen (Abb. 3.3). Damit ergibt sich die Anzahl der einfliegenden Teilchen im Kreisring

$$dn = \underbrace{2\pi\, b\, db}_{Kreisring}\; F\,, \tag{3.36}$$

die außerdem den Stoßparameter b als inneren Radius und die infinitesimale Breite db enthält. Die Anzahl der gestreuten Teilchen, die im Raumwinkel $d\Omega$ gemessen werden, hängt mit dem partiellen Wirkungsquerschnitt der Streubahn

$$\begin{aligned} dn &= F\,\frac{d\sigma}{d\Omega}\,d\Omega \qquad \text{mit } d\Omega = 2\pi\sin\theta\, d\theta \\ dn &= F\,\frac{d\sigma}{d\Omega}\,2\pi\sin\theta\, d\theta \end{aligned} \tag{3.37}$$

zusammen. Auf dem Weg zum Detektor wird angenommen, dass keines der gestreuten Teilchen verloren geht, d.h. es wird Kontinuität angenommen. Damit erhält man für den partiellen Wirkungsquerschnitt folgenden Zusammenhang

$$\begin{aligned} dn_1 &= dn_1 \\ 2\pi\, b\, db\, F &= F\,\frac{d\sigma}{d\Omega}\,d\Omega\, 2\pi\sin\theta\, d\theta \\ \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{b}{\sin\theta}\left|\frac{db}{d\theta}\right|, \end{aligned} \tag{3.38}$$

für den nun die Beziehung zwischen dem Stoßparameter b und dem Streuwinkel θ hergeleitet werden muss. Dazu werden einige Betrachtungen zur Bahnkurve in Näherung eines hyperbolischen Verlaufs vorgenommen, weil es sich hier um ein Streuproblem handelt. So wäre die Bahnkurve für ein Keplerproblem für die Bewegung an einem Zentralkörper eine Ellipse [Grau 1993, Fließbach 2008]. Der hyperbolische Verlauf hat als Bahnkurve folgende Form

$$\frac{|p|}{\rho} = -1 - \varepsilon\cos\phi\,. \tag{3.39}$$

Darin sind ρ der Abstand zwischen Streuzentrum und zu streuendem Teilchen, ε die Exzentrizität der Bahn und $p = -l^2 m\alpha$ ein Parameter, der vom Betrag des konstanten Drehimpulses, der reduzierten Masse m und den Coulombkräften der Kernladungen $\alpha = Z_1 Z_2 e^2$ abhängt. Formt man den Zusammenhang (3.39)

um und führt Grenzbetrachtungen durch, dann ergibt sich

$$\begin{aligned}\rho(\phi) &= \frac{|p|}{-1-\varepsilon\cos\phi} \\ &\text{mit } \rho_{min} \Rightarrow \phi_{\min} = \pi \;\Rightarrow\; \rho_{\min}(\phi_{\min}) = \frac{|p|}{-1+\varepsilon} \\ &\text{und } \rho = \infty \Rightarrow \cos\phi_\infty = -\frac{1}{\varepsilon} \Rightarrow \lim_{\cos\phi_\infty \to -\frac{1}{\varepsilon}} \rho(\phi_\infty) = \infty\,. \end{aligned} \tag{3.40}$$

Somit ergibt sich für die gesuchte Winkeldifferenz ϕ_0 folgender Zusammenhang

$$\begin{aligned}\phi_0 &= |\phi_{\min} - \phi_\infty| = |\pi - \phi_\infty| \\ \cos\phi_0 &= \cos|\pi - \phi_\infty| = -\cos\phi_\infty = \frac{1}{\varepsilon} \\ &= \frac{1}{\sqrt{1+\frac{2Eb}{Z_1 Z_2 e^2}^2}}\,, \end{aligned} \tag{3.41}$$

der mit dem Stoßparameter b verbunden ist. Mit dem Einsatz der Winkelbeziehung

$$\cos x = \frac{1}{\sqrt{1+\tan^2 x}}\,, \tag{3.42}$$

kann man das Ergebnis aus Gleichung (3.41) weiter umformen und erhält folgende Gleichung für die Winkeldifferenz ϕ_0

$$\tan\phi_0 = \frac{2Eb}{Z_1 Z_2 e^2}\,. \tag{3.43}$$

In der Abbildung (3.3) ist die Beziehung zwischen dem Streuwinkel θ und dem Öffnungswinkel der Hyperbel ϕ zu erkennen

$$\theta = \pi - 2\phi_0 \;\rightarrow\; \phi_0 = \frac{\pi-\theta}{2}\,, \tag{3.44}$$

die hilft endlich eine Beziehung zwischen dem Stoßparameter b und dem Streuwinkel θ herzustellen

$$\tan\Big(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\Big) = \cot\frac{\theta}{2} = \frac{2Eb}{Z_1 Z_2 e^2}\,. \tag{3.45}$$

Dieser Zusammenhang zwischen dem Stoßparameter b und dem Streuwinkel θ erlaubt endlich die Bestimmung des partiellen Wirkungsquerschnitts. Dazu

sind einige Umformungen mit verschiedenen mathematischen Rechenregeln erforderlich [Grau 1993, Fließbach 2008]

$$
\begin{aligned}
b = b(\theta) &= \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E}\cot\frac{\theta}{2} \\
\frac{db}{d\theta} &= -\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E}\frac{1}{2}\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}} = -\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E}\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}} \\
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{b}{sin\theta}\left|\frac{db}{d\theta}\right| = \frac{1}{sin\theta}\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E}\cot\frac{\theta}{2}\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E}\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E}\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E}\frac{\cot\frac{\theta}{2}}{\sin\theta\sin^2\frac{\theta}{2}} \\
&= \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E}\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E}\frac{\cot\frac{\theta}{2}}{\frac{2\tan\frac{\theta}{2}}{1+\tan^2\frac{\theta}{2}}\sin^2\frac{\theta}{2}} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E}\right)^2\frac{\cot\frac{\theta}{2}}{\frac{\tan\frac{\theta}{2}}{1+\tan^2\frac{\theta}{2}}\sin^2\frac{\theta}{2}} \\
&= \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E}\right)^2\frac{(1+\tan^2\frac{\theta}{2})\cot^2\frac{\theta}{2}}{\sin^2\frac{\theta}{2}} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E}\right)^2\frac{\cot^2\frac{\theta}{2}+1}{\sin^2\frac{\theta}{2}} \\
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E}\right)^2\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}\,. \qquad (3.46)
\end{aligned}
$$

Am Ende dieser Umformungen steht in (3.46) der Rutherfordsche Wirkungsquerschnitt, wie er experimentell in den von Marsden und Geiger durchgeführten Experimenten in den Jahren 1909-13 nachgewiesen wurde und deren Ergebnisse durch Rutherford theoretisch erklärt worden sind [Fließbach 2008]. Im Folgenden wird das Probelm mittels quantentheoretischem Ansatz über den Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{p}',\vec{p})|^2 \qquad (3.47)$$

mit der zu bestimmenden Wahrscheinlichkeitsamplitude $f(\vec{p}',\vec{p})$ berechnet. Im Folgenden wird gezeigt, wie man mit dem quantentheoretischen Ansatz den Term der Rutherfordstreuung erhält. Ausgangspunkt der Berechnung der Wahrscheinlichkeitsamplitude $f(\vec{p}',\vec{p})$ ist der erste Term der Bornschen Reihe [Neufeld 2012]

$$f(\vec{p}',\vec{p}) = -(2\pi)^2 m\hbar\sum_{n=0}^{\infty}\langle\vec{p}'|(V\,G_0(E_{\vec{p}}+i\varepsilon))^n V|\vec{p}\rangle\,, \qquad (3.48)$$

wobei $G_0(E_{\vec{p}}+i\varepsilon)$ ein Wert aus dem Greenschen Operator [Neufeld 2012] ist. Der führende Term, der sogenannten ersten Bornschen Näherung, lautet:

$$f^0(\vec{p}',\vec{p}) = -(2\pi)^2\langle\vec{p}'|V|\vec{p}\rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3x\exp\left(\frac{-i(\vec{p}'-\vec{p})\vec{x}}{\hbar}\right)V(\vec{x})\,. \qquad (3.49)$$

Als Potential empfiehlt sich die Verwendung des Yukawapotentials mit einem konvergenzerzeugenden Exponentialterm für das Coulombpotential im Integral (3.49). Das Yukawapotential hat die Form [Fließbach 2008, Grau 1993, Neufeld 2012]

$$V(\vec{x}) = \gamma \frac{e^{-\kappa r}}{r} \qquad \text{mit } r = |\vec{x}|\,, \tag{3.50}$$

wobei im Grenzwert $\kappa = 0$ das Coulombpotential herauskommt. Damit lautet die erste Bornsche Näherung

$$\begin{aligned} f^0(\vec{p}\,',\vec{p}) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3x \exp\left(\frac{-i(\vec{p}\,'-\vec{p})\vec{x}}{\hbar}\right)\gamma\frac{e^{-\kappa r}}{r} \\ &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3x \exp\left(\frac{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}{\hbar}\right)\gamma\frac{e^{-\kappa r}}{r}\,, \end{aligned} \tag{3.51}$$

die auch mit Kugelkoordinaten ausgedrückt werden kann

$$\begin{aligned} &= \gamma \int\limits_{r=0}^{\infty} dr\, r^2 \int\limits_{\cos\theta=-1}^{+1} d\cos\theta \int\limits_{\phi=0}^{2\pi} d\phi\, \frac{\exp(-\kappa r)}{r} \exp\Big(\frac{-i|\vec{q}\,|r\cos\theta}{\hbar}\Big) \\ &= 2\pi\gamma \int\limits_{r=0}^{\infty} dr\, r^2\, \frac{\exp(-\kappa r)}{r} \int\limits_{\cos\theta=-1}^{+1} d\cos\theta \exp\Big(\frac{-i|\vec{q}\,|r\cos\theta}{\hbar}\Big)\,. \end{aligned} \tag{3.52}$$

Zuerst wird das Integral über die Variable $\cos\theta$ berechnet

$$\begin{aligned} &= 2\pi\gamma \int\limits_{r=0}^{\infty} dr\, r^2\, \frac{\exp(-\kappa r)}{r} \left[\frac{\hbar \exp\Big(\frac{-i|\vec{q}\,|r\cos\theta}{\hbar}\Big)}{-i|\vec{q}\,|r}\right]\Bigg|_{\cos\theta=-1}^{+1} \\ &= \frac{2i\pi\gamma\hbar}{|\vec{q}\,|} \int\limits_{r=0}^{\infty} dr \exp(-\kappa r) \left[\exp\Big(\frac{-i|\vec{q}\,|r}{\hbar}\Big) - \exp\Big(\frac{i|\vec{q}\,|r}{\hbar}\Big)\right]. \end{aligned} \tag{3.53}$$

Nun kann man das Integral über die Variable r berechnen, wodurch sich auch wieder einige Vereinfachungen ergeben,

$$\begin{aligned} &= \frac{2i\pi\gamma\hbar}{|\vec{q}\,|}\left[\frac{\exp\Big(-\kappa r - \frac{i|\vec{q}\,|r}{\hbar}\Big)}{-\kappa - \frac{i|\vec{q}\,|}{\hbar}} - \frac{\exp\Big(-\kappa r + \frac{i|\vec{q}\,|r}{\hbar}\Big)}{-\kappa + \frac{i|\vec{q}\,|}{\hbar}}\right]\Bigg|_{r=0}^{\infty} \\ &= \frac{2i\pi\gamma\hbar}{|\vec{q}\,|}\left[\frac{1}{-\kappa + \frac{i|\vec{q}\,|}{\hbar}} - \frac{1}{-\kappa - \frac{i|\vec{q}\,|}{\hbar}}\right] \\ &= \frac{2i\pi\gamma\hbar}{|\vec{q}\,|}\left[\frac{1}{\frac{i|\vec{q}\,|}{\hbar} - \kappa} + \frac{1}{\frac{i|\vec{q}\,|}{\hbar} + \kappa}\right] \end{aligned} \tag{3.54}$$

und schließlich kann man mittels Addition der auf einen gemeinsamen Nenner gebrachten Brüche den Ausdruck weiter vereinfachen:

$$= \frac{2i\pi\gamma\hbar}{|\vec{q}|} \frac{\frac{-2i|\vec{q}|}{\hbar}}{\frac{|\vec{q}|^2}{\hbar^2} + \kappa^2} = \frac{4\pi\hbar^2\gamma}{|\vec{q}|^2 + \hbar^2\kappa^2} \,. \tag{3.55}$$

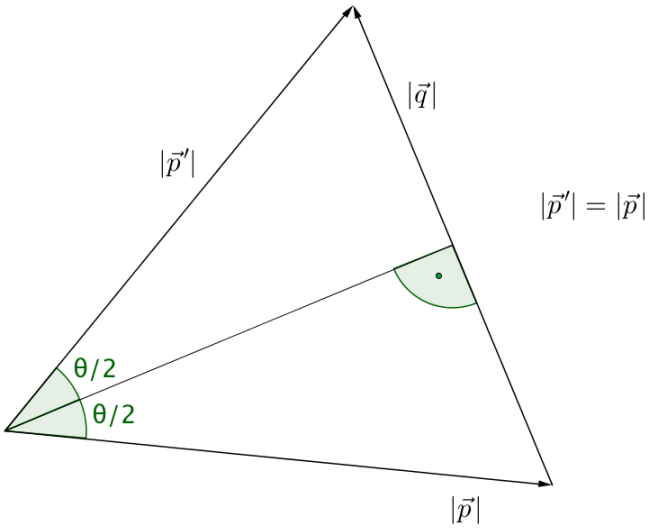


Abbildung 3.4: Beziehung zwischen den Impulsen $\vec{p}$ vor und $\vec{p}'$ nach der Steuung

Die Lösung (3.55) wird nun in die ersten Bornsche Näherung (3.51) eingesetzt und es ergibt sich

$$f^0(\vec{p}', \vec{p}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{4\pi\hbar^2\gamma}{|\vec{q}|^2 + \hbar^2\kappa^2} = -\frac{2m\gamma}{|\vec{q}|^2 + \hbar^2\kappa^2} \,. \tag{3.56}$$

Die gewonnene Wahrscheinlichkeitsamplitude (3.56) wird als Quadrat in (3.47) verwendet

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2m\gamma}{|\vec{q}|^2 + \hbar^2\kappa^2} \right)^2 . \tag{3.57}$$

Aus Abbildung (3.4), in der die Differenz des Teilchenimpulses $\vec{q}$ der Impulse $\vec{p}$ vor und $\vec{p}'$ nach der Streuung am Atomkern dargestellt wurde, ist der folgende

Zusammenhang herleitbar

$$\frac{|\vec{q}|}{2} = |\vec{p}|\sin\frac{\theta}{2}\,, \tag{3.58}$$

die in (3.57) eingesetzt wird und somit sich folgendes ergibt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2m\gamma}{4|\vec{p}\,|^2\sin^2\frac{\theta}{2} + \hbar^2\kappa^2}\right)^2. \tag{3.59}$$

Setzt man für den Parameter $\kappa = 0$ und für $\gamma = Z_1 Z_2 e^2$ die Kernladungszahlen der Streupartner ein, dann erhält man die Rutherfordsche Streuformel

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{mZ_1Z_2e^2}{2|\vec{p}\,|^2\sin^2\frac{\theta}{2}}\right)^2. \tag{3.60}$$

Mit der Energie $E = |\vec{p}\,|^2/2m$ erhält man die bekannte Gleichung des differentiellen Wirkungsquerschnitts der Rutherfordstreuung (3.46) [Grau 1993, Basdevant 2002, Neufeld 2012, Fließbach 2008]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1Z_2e^2}{4E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}\,. \tag{3.61}$$

Es ist bemerkenswert, dass in diesem Fall die klassische Mechanik und die Quantentheorie das gleiche Ergebnis liefern.
Im anschließenden Kapitel werden die gleichen quantentheoretischen Beispiele mit Hilfe der Feynmanschen Pfadintegralmethode nachvollzogen.

4 Beschreibung ausgewählter quantentheoretischer Beispiele nach Feynman

4.1 Grundlagen des Pfadintegrals nach Feynman

Für die folgenden Betrachtungen wird von einem Teilchen ausgegangen, dass sich in einem Potential $V(x)$ bewegt. Dabei wird es nicht einfach sein, eine geschlossene Lösung des zeitunabhängigen Ausbreitungskerns [Blau 2006/07, Feynman 1965]

$$\langle x_f | e^{-(i/\hbar)(t_f - t_i)H} | x_i \rangle \tag{4.1}$$

zu finden. Durch die Ausnutzung der Eigenschaften der Faltung kann man aber das Problem eines zeitlich ausgedehnten Ausbreitungskerns auf eine Summe zeitlich infinitesimal verkürzter Ausbreitungskerne umformulieren. Diesen Ansatz kann man dann berechnen, dazu werden im Folgenden einige Gedanken besprochen. Zuerst wird das Zeitintervall $[t_i; t_f]$ im Ansatz (4.1) in eine Anzahl N gleich langer Zeitintervalle $[t_k; t_{k+1}]$ aufgeteilt

$$\langle x_f | e^{-(i/\hbar)(t_f - t_i)H} | x_i \rangle = \langle x_f | \Big(e^{-(i/\hbar)\frac{(t_f - t_i)}{N} H} \Big)^N | x_i \rangle \,, \tag{4.2}$$

dabei entspricht die Dauer eines Zeitintervalls τ zwischen Anfangszeit- und Endzeitpunkt für die Anzahl von N Intervallen dem Ausdruck

$$\tau = t_{k+1} - t_k = \frac{(t_f - t_i)}{N} \,. \tag{4.3}$$

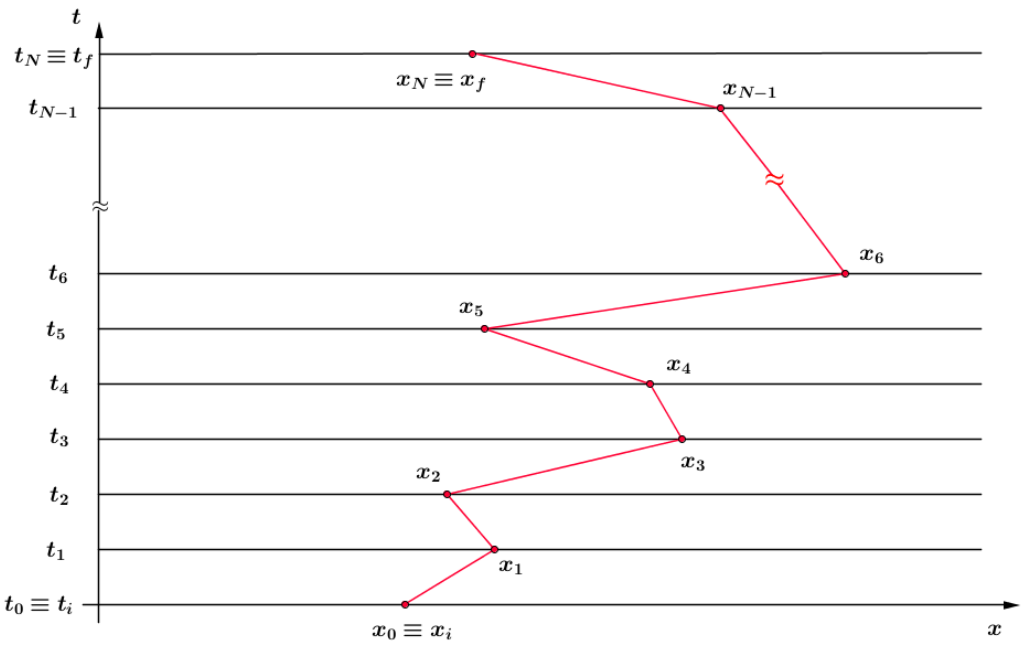


Abbildung 4.1: Darstellung eines beliebigen Pfades aus Gleichung (4.2)

In Abbildung (4.1) ist ein Weg für ein Teilchen im Potential $V(x)$ dargestellt, wobei der Anfangsort x_i und Endort x_f für alle anderen Wege der gleiche sind. Nur der Verlauf der Wege unterscheidet sich von einander, nicht deren Anfangsbedingungen. Der Weg des Teilchens durch das Potential kann in N Wegabschnitte zerlegt werden. Nach Feynmans Grundprinzip 4 multipliziert man die Wahrscheinlichkeitsamplitude/Ausbreitungskerne entlang eines Weges. In Gleichung (4.2) erkennt man dies an der Nten Potenz der Exponentialfunktion. Damit kann man (4.2) wie folgt

$$\langle x_f | \underbrace{e^{-(i/\hbar)\tau H} e^{-(i/\hbar)\tau H} ... e^{-(i/\hbar)\tau H} e^{-(i/\hbar)\tau H}}_{N-mal} | x_i \rangle \rangle \tag{4.4}$$

schreiben und muss nun noch so angepasst werden, dass sie auch alle unabhängigen Teilwege enthält. Nach den im Kapitel (2.3) besprochenen Grundprinzipien der Quantentheorie nach Feynman ist das eine Addition, die hier durch Integrale ausgedrückt werden. Dazu werden $N-1$ Vollständigkeitsrelationen des

Ortes eingefügt

$$\langle x_f| \underbrace{e^{-(i/\hbar)\tau H} \int dx_{N-1}|x_{N-1}\rangle\langle x_{N-1}|e^{-(i/\hbar)\tau H} ... \int dx_1|x_1\rangle\langle x_1|\, e^{-(i/\hbar)\tau H}}_{N-\text{mal}} |x_i\rangle\rangle\,, \tag{4.5}$$

die den Wert der Gleichung nicht verändern. Nun ist das kein sehr komfortabler Ausdruck. Im ersten Schritt werden die Integrale der einzelnen Variablen x_k herausgehoben, d.h. die verschiedenen Wege werden herausgeholt. Übrig bleiben dann noch die Ausbreitungskerne für die jeweiligen Teilwege $K(x_k, x_{k-1}, \tau)$. Damit ergibt sich folgende Gleichung

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{dx_{N-1} \int ... \int dx_1}_{N-1\,\text{Integrationen}} \underbrace{\langle x_f|e^{-(i/\hbar)\tau H}|x_{N-1}\rangle}_{K(x_f,x_{N-1},\tau)} ... \underbrace{\langle x_2|e^{-(i/\hbar)\tau H}|x_1\rangle}_{K(x_2,x_1,\tau)} \underbrace{\langle x_1|e^{-(i/\hbar)\tau H}|x_i\rangle}_{K(x_1,x_i,\tau)}\,. \tag{4.6}$$

Mit der Produktschreibweise kann man den Ausdruck in (4.6) schöner angeben. Dabei gilt es zu beachten, dass es N Ausbreitungskerne K gibt, weshalb die zugehörige Produktvariable k für die Ausbreitungskerne im Intervall 0 bis $N-1$ läuft. Während die Produktvarialbe k für die Integrationen nach dx_k im Intervall von 1 bis $N-1$ läuft. Der Ausdruck (4.6) zeigt auch, dass es $(N-1)$ Integrale gegenüber N Ausbreitungskernen gibt, so dass man folgende Schreibweise

$$K(x_f, x_i; t_f - t_i) = \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k\right]\left[\prod_{k=0}^{N-1} K(x_f, x_i; \tau = t_{k+1} - t_k)\right] \tag{4.7}$$

erhält. Das Problem (4.7) ist nur dann einfach lösbar, wenn man nun die Anzahl N der Intervalle gegen unendlich laufen lässt und somit das Zeitintervall τ immer kürzer wird, d.h. $\tau \to 0$. Damit ist der Ausbreitungskern

$$K(x_f, x_i; t_f - t_i) = \lim_{N\to\infty}\left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k\right]\left[\prod_{k=0}^{N-1} K(x_f, x_i; \tau = \frac{t_f - t_i}{N})\right], \tag{4.8}$$

durch den Kurzzeitausbreitungskern $K(x_f, x_i; \tau)$ bestimmt [Blau 2006/07]. Das Anfangsproblem (4.1) kann man nun für ein Teilchen im Potential $V(x)$ mit Hilfe der gefundenen Kurzzeitausbreitungskerne umformulieren. Dabei ist die Hamiltonfunktion H die Summe aus kinetischer Energie T und potentieller Engerie V, letzeres wird auch meist kurz Potential genannt. Mit Hilfe einer Reihenzerlegung nach der Baker-Campell-Hausdorf-Formel für infinitesimal kleine

Zeitintervalle kann der Exponentialterm in zwei Exponentialterme zerlegt werden. Dabei wird im folgenden Ausdruck

$$K(x_{k+1}, x_k; \tau) = \langle x_{k+1} | e^{-(i/\hbar)\tau(T+V)} | x_k \rangle \tag{4.9}$$

die Exponentialfunktion zerlegt. Die Anwendung der Baker-Campell-Hausdorf-Formel auf diese Exponentialfunkion kann bei infinisitemal kleinen Zeitintervallen mit den τ^2-Reihengliedern abgebrochen werden. Diese Überlegung wird im Folgenden ausgeführt

$$\begin{aligned}
e^{x+y+A} &= e^x e^y \\
\mathbb{1} + x + y + A + \frac{(x+y+A)^2}{2!} ... &= \left(\mathbb{1} + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} ... \right) \\
&\quad \left(\mathbb{1} + y + \frac{y^2}{2!} + \frac{y^3}{3!} ... \right) \\
\mathbb{1} + x + y + A + \frac{x^2 + y^2 + xy + yx + ...}{2!} ... &= \mathbb{1} + y + \frac{y^2}{2!} + x + xy + \frac{x^2}{2!} ... \\
A + \frac{xy + yx}{2} &= xy \\
A &= \frac{xy - yx}{2} \\
A &= \frac{[x, y]}{2} \\
&\text{mit } x = \frac{-i\,\tau\,T}{\hbar};\; y = \frac{-i\,\tau\,V}{\hbar}\,,
\end{aligned} \tag{4.10}$$

dabei ergibt sich ein Term A. Der Term A in (4.10) enthält ein τ^2, d.h. bei sehr kleinen Zeitintervallen kann der Term A vernachlässigt werden. Dies ist eine der Forderungen für die näherungsweise Bestimmung des Ausbreitungskerns mit Hilfe des Pfadintegrals, so dass Terme der zweiten Ordnung mit $O(\tau^2)$ vernachlässigt werden können

$$\begin{aligned}
e^{-(i/\hbar)\tau(T+V)} &= e^{-(i/\hbar)\tau T} e^{-(i/\hbar)\tau V} + O(\tau^2) \\
K(x_{k+1}, x_k; \tau) &= \langle x_{k+1} | e^{-(i/\hbar)\tau T} e^{-(i/\hbar)\tau V} | x_k \rangle\,.
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Nach Anwendung der Vollständigkeitsrelation für den Impuls des Ausbreitungskerns (Propagator) mit der reihenentwickelten Näherung der Exponentialfunktion kann man das folgende Integral aufstellen

$$K(x_{k+1}, x_k; \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp_k \langle x_{k+1} | e^{-(i/\hbar)\tau T} | p_k \rangle \langle p_k | e^{-(i/\hbar)\tau V} | x_k \rangle\,, \tag{4.12}$$

welches sich vorteilhaft berechnen lässt. Der Impulsoperator T steht vor dem Impulseigenzustand $|p_k\rangle$, genauso wie der Ortsoperator V vor dem Ortseigenzustand $|x_k\rangle$ steht. Beim Herausziehen der beiden Operatoren aus dem Sandwich ändert sich nichts an den Operatoren, so dass sich das Integral

$$K(x_{k+1}, x_k; \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp_k \langle x_{k+1}|p_k\rangle \, \langle p_k|x_k\rangle \, e^{-(i/\hbar)\tau \, (T(p_k)-V(x_k))} \tag{4.13}$$

ergibt. Die beiden Impulseigenfunktionen im Ortsraum können mit der Gleichung

$$\langle x|p\rangle = \frac{e^{\frac{i\,p\,x}{\hbar}}}{\sqrt{2\,\pi\,\hbar}} \tag{4.14}$$

ausgedrückt werden, dabei muss man beim zweiten Skalarprodukt die komplexe Konjugation $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$ beachten. Dann lautet der Ausbreitungskern des Teilstückes entlang eines Pfades

$$\begin{aligned} K(x_{k+1}, x_k; \tau) &= \frac{1}{2\,\pi\,\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_k \, e^{(i/\hbar)\tau \left[p_k \frac{x_{k+1}-x_k}{\tau} - (T(p_k)-V(x_k))\right]} \\ &= \frac{1}{2\,\pi\,\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_k \, e^{(i/\hbar)\left[p_k \,(x_{k+1}-x_k) - \tau(\frac{p_k^{\,2}}{2m} - V(x_k))\right]} \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\,i\,\pi\,\hbar\,\tau}} \, e^{(i/\hbar)\tau\left[\frac{m\,(x_{k+1}-x_k)^{\,2}}{2\tau^{\,2}} - V(x_k)\right]} , \end{aligned} \tag{4.15}$$

in dessen Exponenten die zeitunabhängige Lagrangefunktion für ein Teilchen im Potential $V(x)$ enthalten ist, so dass man ihn folgendermaßen verkürzt

$$K(x_{k+1}, x_k; \tau) = \sqrt{\frac{m}{2\,i\,\pi\,\hbar\,\tau}} \, e^{(i/\hbar)\tau \, L(x_k, \dot{x}_k)} \quad \text{mit} \quad \frac{x_{k+1}-x_k}{\tau} = \dot{x}_k \tag{4.16}$$

aufschreiben kann. Nun kann man die erste Zeile von (4.16) des Ausbreitungskerns eines Teilstücks $K(x_{k+1}, x_k; \tau)$ mit der Hamiltonfunktion $H(p_k, x_k)$ in die Gleichung (4.8) für den Ausbreitungskern eines Teilchen $K(x_f, x_i; t_f - t_i)$ vom Punkt i zum Endpunkt f einsetzen und erhält

$$K(x_f, x_i; t_f - t_i) = \lim_{N\to\infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k\right] \left[\prod_{k=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_k}{2\,\pi\,\hbar} e^{\frac{i\tau}{\hbar}\left[p_k \frac{x_{k+1}-x_k}{\tau} - H(p_k, x_k)\right]}\right] . \tag{4.17}$$

Das Produkt der Exponentialfunktionen entspricht der Addition der Exponenten, womit sich

$$K(x_f, x_i; t_f - t_i) = \lim_{N\to\infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \right] \left[\prod_{k=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_k}{2\,\pi\,\hbar} \right] e^{\frac{i\tau}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left[p_k \frac{x_{k+1}-x_k}{\tau} - H(p_k, x_k) \right]} \tag{4.18}$$

ergibt. Darin bedeuten [Blau 2006/07, Feynman 1948, Feynman 1965]

- $\lim_{N\to\infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \right]$ = Produkt aller alternativen Pfade und
- $\lim_{N\to\infty} \left[\prod_{k=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_k}{2\,\pi\,\hbar} e^Q \right]$ = Produkt aller Teilstücke entlang eines Pfades mit dem Exponenten $Q = \exp\left(\frac{i\tau}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left[p_k \frac{x_{k+1}-x_k}{\tau} - H(p_k, x_k) \right] \right)$.

Die beiden Produkte in (4.18) kann man als Integralmaße verstehen. Es geht bei den Integralmaßen um die Stützpunkte $x_k; p_k$ in äquidistanten Abständen. Wenn die Anzahl der Intervalle gegen Unendlich strebt, dann wird die Teilung eines Weges immer feiner werden, d.h. die Stützstellen x_k und p_k gehen in Funktionen der Zeit $x(t); p(t)$ über, wobei die Zeit eine kontinuierliche Variable ist. Die Integralmaße des Ausbreitungskerns $K(x_f, x_i; t_f - t_i)$ sind damit definiert

$$\begin{aligned} \mathcal{D}x &= \prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \\ \mathcal{D}p &= \prod_{k=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_k}{2\,\pi\,\hbar} \end{aligned} \tag{4.19}$$

und können anschließend in (4.18) eingesetzt werden. Das Einsetzen der Integralmaße (4.19) in die Gleichung (4.18) führt zu

$$K(x_f, x_i; t_f - t_i) = \int \mathcal{D}x\mathcal{D}p \, \exp\left(\frac{i\tau}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[p\dot{x} - H(p, x) \right] \right), \tag{4.20}$$

die als Pfadintegral bekannt ist. Der so geschriebene Ausbreitungskern kann weiter vereinfacht werden. Dazu wird angenommen, dass die Hamiltonfunktion eines Teilchens im Potential $V(x)$ folgendermaßen lautet

$$H(p, x) = \frac{p^2}{2m} - V(x) \tag{4.21}$$

und in Gleichung (4.18) eingesetzt wird. Damit ergibt sich in Gleichung (4.18) eine Exponentialfunktion die von p^2 abhängt. Mit Hilfe der Bildung eines vollständigen Quadrates kann man diese Gaußfunktion über p integrieren

$$\begin{aligned} K(x_f, x_i; t_f - t_i) &= \lim_{N\to\infty} \left[\prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \right] \left[\prod_{k=0}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_k}{2\,\pi\,\hbar} \right] e^{\frac{i\tau}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left[p_k \frac{x_{k+1}-x_k}{\tau} - H(p_k, x_k) \right]} \\ &= \lim_{N\to\infty} \prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \prod_{k=0}^{N-1} \left\{ \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\tau}} e^{\frac{i\tau}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\tau} \right)^2 - V(x_k) \right]} \right\} \\ &= \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\tau} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_k \left\{ e^{\frac{i\tau}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\tau} \right)^2 - V(x_k) \right]} \right\}, \end{aligned} \tag{4.22}$$

das im Allgemeinen einen Vorfaktor und eine Exponentialfunktion mit dem Term der quadratischen Ergänzung ergibt. Unter Anwendung des Grenzüberganges und Einführung des Integralmaßes für den Ort x_k ergibt sich eine Formulierung des Ausbreitungskerns

$$\begin{aligned} K(x_f, x_i; t_f - t_i) &= \mathcal{N} \int_{x_i}^{x_f} \mathcal{D}x\, e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{k+1}-x_k}{\tau} \right)^2 - V(x_k) \right]} \\ &= \mathcal{N} \int_{x_i}^{x_f} \mathcal{D}x\, e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt\, \mathcal{L}(x,\dot{x})} \\ &= \mathcal{N} \int_{x_i}^{x_f} \mathcal{D}x\, e^{\frac{i}{\hbar} S(x)} \end{aligned} \tag{4.23}$$

basierend auf der Lagrangefunktion $\mathcal{L}$ oder der Wirkung S. Der Wert des Normierungsfaktors $\mathcal{N}$ steht in Gleichung (4.22). Die bisherigen Betrachtungen wurden für den zeitunabhängigen Fall vorgenommen.

4.2 Betrachtungen des zeitabhängigen Falls

Der Zeitentwicklungsoperator $U(t_f, t_i)$ sei für die folgenden Betrachtungen ein zeitabhängiger Ausdruck mit dem Impulsoperator p in Impulsraumschreibweise

$$U(t_f, t_i) = \mathcal{T}\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt' H(t')}\right) \qquad \text{mit} \quad H(t') = \frac{p^2}{2m} + V(x, t')\,, \tag{4.24}$$

wobei $\mathcal{T}$ das Zeitordnungssymbol

$$\mathcal{T}[A(t)\,B(t') = \begin{cases} A(t)\,B(t') & \text{wenn } t > t' \\ B(t')\,A(t) & \text{wenn } t < t' \end{cases} \tag{4.25}$$

ist. Es sein noch einmal daran erinnert, dass in der Quantentheorie Gleichungen von rechts nach links gelesen werden, d.h. die Anfangsbedingung steht immer rechts. Dieses Zeitordnungssymbol schreibt vor, dass die Zeitentwicklung immer von einem früheren Zeitpunkt zu einem späteren Zeitpunkt erfolgt, d.h. $t_f > t_i$. Damit ist die Entwicklungsgleichung auf Grundlage des folgenden Eigenwertproblems

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t_f}U(t_f, t_i) = H(t_f)U(t_f, t_i) \tag{4.26}$$

nur für voranschreitende Zeiten erfüllt. Im zeitabhängigen Fall lautet dann der Ausbreitungskern mit dem Zeitentwicklungsoperator (4.24)

$$\langle x_f|U(t_f, t_i)|x_i\rangle = \langle x_f|\mathcal{T}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt' H(t')\right)|x_i\rangle\,, \tag{4.27}$$

der wieder in N verschiedene Pfade wie in Abbildung (4.1) zerlegt werden kann, wobei jetzt jeder Pfad einen anderen Wert des zeitabhängigen Potentials $H(t')$ enthält. Die Gleichung (4.27) kann man nun so schreiben, dass sich ein Produkt von N Faktoren ergibt:

$$\langle x_f|\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_{N-1}}^{t_N=t_f} dt' H(t')}\; e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_{N-2}}^{t_{N-1}} dt' H(t')} \ldots e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2} dt' H(t')}\; e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0=t_i}^{t_1} dt' H(t')}}_{N-\text{mal}}|x_i\rangle\,. \tag{4.28}$$

Dabei gilt wieder, dass für den Fall N gegen unendlich der zu integriende Zeitbereich in jedem Exponentialterm unendlich klein wird. Nun kann man wieder

Vollständigkeitsrelationen $\int_{-\infty}^{+\infty} dp\,|p\rangle\langle p| = \mathbb{1}$ einfügen und die Integrale in den Exponenten bestimmen. Diese haben in jedem Teilstück eines Pfades einen anderen Wert $H_{N-1}...H_1$ und es ergibt sich

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{dx_{N-1}...\int dx_1}_{N-1\,\text{Integrationen}} \underbrace{\langle x_f|e^{-(i/\hbar)\tau H_{N-1}}|x_{N-1}\rangle}_{K(x_f,x_{N-1},\tau)} ... \underbrace{\langle x_2|e^{-(i/\hbar)\tau H_1}|x_1\rangle}_{K(x_2,x_1,\tau)} \underbrace{\langle x_1|e^{-(i/\hbar)\tau H_0}|x_i\rangle}_{K(x_1,x_i,\tau)} . \tag{4.29}$$

Bisher sind die gleichen Überlegungen wie beim zeitinvarianten Fall durchgeführt worden. Beim zeitinvarianten Fall erhält man als Ergebnis einen Ausbreitungskern in Abhängigkeit von der Langrangefunktion L, die vom Ort x und der Ableitung des Ortes nach der Zeit $\dot{x}$ abhängt. Für den zeitabhängigen Fall sollte die Langrangefunktion auch von der Zeit abhängen. Der Ausbreitungskern lautet dann

$$\begin{aligned} K(x_f, x_i; t_f - t_i) &= N \int_{x_i}^{x_f} \mathcal{D}x\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt\, L(x,\dot{x},t)} \\ &= N \int_{x_i}^{x_f} \mathcal{D}x\, e^{\frac{i}{\hbar}S(x,t)}\,, \end{aligned} \tag{4.30}$$

d.h. es ergibt sich im zeitabhangigen Fall das gleiche Ergebnis wie im zeitinvarianten Fall mit dem Unterschied, dass die Lagrangefunktion $L(x, \dot{x}, t)$ und die Wirkung $S(x, t)$ zeitabhängig sind.

4.3 Die Störungsmethode in der Quantenmechanik

Viele Probleme lassen sich nicht exakt lösen. Die Störungsmethde ist eine Möglichkeit viele weitere Problem der Quantentheorie zu berechnen, wenn die Wechselwirkung mit einem Potential viel kleiner als die kinetische Energie ist. Außerdem hat diese Methode den Vorteil, dass sich anschauliche Lösungen ergeben. Im Folgenden wird zuerst die Grundlage der Störungsmethode (Störungsentwicklung) gelegt und dann ein Beispiel bis zu Energietermen der n-ten Ordnung beschrieben. Ziel soll es sein aufzuzeigen, welche Vorteile diese Methode für die Betrachtung der Quantentheorie gegenüber den Eigenwertproblemen hat. Die Grundlage für die nachfolgenden Betrachtungen [Feynman 1965] bildet der Ausbreitungskern (Ausbreitungswahrscheinlichkeitsamplitude) K_V für

die eindimensionale Bewegung eines Teilchens von Punkt x_i zur Zeit t_i zum Punkt x_f zur Zeit t_f [Blau 2006/07, Feynman 1965]

$$K_V(x_f, x_i; t_f - t_i) = \int_{x_i}^{x_f} \mathcal{D}x(t) \left(\exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x,t) \right] dt \right\} \right) \tag{4.31}$$

und kann ohne weiteres auf drei Dimensionen erweitert werden. Das Pfadintegral (4.31) ist eine zeitabhängige Gleichung mit der Lagrangefunktion für die Bewegung eines Teilchens im Potential $V(x)$. Das Integral über den Pfad vom Anfangspunkt (x_i, t_i) zum Endpunkt (x_f, t_f) wird über das Integralmaß $\mathcal{D}x(t)$ ausgeführt, damit werden alle möglichen Pfade erfasst, die jeweils in unendliche viele Teilabschnitte mit $\tau = t_{k+1} - t_k$ zerlegt wurden.
Als nächstes werden Umformungen vorgenommen, die mit der Bedingung verknüpft sind, dass die zeitliche Summierung der Potentiale entlang dieses Weges kleiner sind als das Wirkungsquantum. Das Potential kann man unter der Bedingung

$$\left| \frac{1}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt\, V(x,t) \right| << 1 \tag{4.32}$$

in eine Reihe entlang eines Pfades entwickeln und dann wieder in Gleichung (4.31) einsetzen,

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} V(x,t)\, dt \right] = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} V(x,t)\, dt + \frac{1}{2!} \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \left[\int_{t_i}^{t_f} V(x,t)\, dt \right]^2 \ldots , \tag{4.33}$$

um die Informationen aller möglichen Pfade zu erhalten. Auf der rechten Seite von Gleichung (4.33) steht als erster Term eine 1, die im Zusammenhang mit Gleichung (4.31) symbolisiert, dass das Teilchen ohne Wechselwirkung mit dem Potential vom Startpunkt x_i, t_i zum Endpunkt x_f, t_f gelangt. Dieser Term entspricht dann in Verbindung mit (4.31) dem Ausbreitungskern eines freien Teilchens K_0. Der zweite Term in (4.33) entspricht einer Wechselwirkung des Teilchens mit dem Potential an einer beliebigen Stelle. Man spricht daher von einem Ausbreitungskern erster Ordnung $K^{(1)}$. Die Ordnung eines Kerns entlang eines Pfades entspricht der Anzahl der Wechselwirkungen des Teilchens mit dem Potential. Daraus ergibt sich für den Ausbreitungskern eines Teilchens von x_i nach x_f die folgende Reihenentwicklung:

$$K_V(x_f, x_i) = K_0(x_f, x_i) + K^{(1)}(x_f, x_i) + K^{(2)}(x_f, x_i) + \ldots . \tag{4.34}$$

Setzt man (4.33) in (4.31) ein, dann erhält man für die Ausbreitungskerne $K^{(N)}$ für N-Wechselwirkungen mit einem Potential die folgenden Gleichungen

$$K_0(x_f, x_i; t_f - t_i) = \int_{x_i}^{x_f} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt \right) \right] \mathcal{D}x(t) \tag{4.35}$$

$$K^{(1)}(x_f, x_i; t_f - t_i) = -\frac{i}{\hbar} \int_{x_i}^{x_f} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt \right) \right] \int_{t_i}^{t_f} V[x(t_1), t_1]\, dt_1 \mathcal{D}x(t) \tag{4.36}$$

$$\begin{aligned} K^{(2)}(x_f, x_i; t_f - t_i) = -\frac{i}{2\hbar^2} \int_{x_i}^{x_f} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt \right) \right] \int_{t_i}^{t_f} V[x(t_1), t_1]\, dt_1 \\ \times \int_{t_i}^{t_f} V[x(t_2), t_2]\, dt_2 \mathcal{D}x(t) \end{aligned} \tag{4.37}$$

für die Ausbreitungskerne bis zur zweiten Ordnung. Es ist leicht zu erkennen, wie die Auflistung der Ausbreitungskerne fortgesetzt werden muss. Allerdings reicht es für die folgenden Betrachtungen aus, keine weiteren Ordnungen anzugeben.

4.4 Bestimmung der Ausbreitungskerne

Die Bestimmung der Ausbreitungskerne $K^{(N)}$ wird am Ausbreitungskern erster Ordnung gezeigt, d.h. das Teilchen geht entlang des Pfades eine Wechselwirkung mit dem Potential $V(x)$ ein. Dazu wird allgemein der Pfad des Teilchens in Wegabschnitte mit dem Ausbreitungskern eines freien Teilchens und Wechselwirkungspunkten geteilt. Hier sind es ein Wechselwirkungspunkt und zwei Wegabschnitte, in denen sich das Teilchen als freies Teilchen bewegt. Das Teilchen bewegt sich im ersten Abschnitt vom Anfangspunkt x_i, t_i zu einem Punkt x_c, t_c, der sich im Potential $V(x)$ befindet. Dann erfolgt die Wechselwirkung mit dem Potential $V(x)$ am Punkt x_c, t_c. Im zweiten Wegabschnitt verhält sich das Teilchen wieder wie im ersten Abschnitt als freies Teilchen, allerdings bewegt es sich nun vom Punkt x_c, t_c zum Endpunkt x_f, t_f. Zum Zeitpunkt $t = t_c$ findet eine Wechselwirkung an beliebigen Punkten x_c im Potential $V(x)$ statt. Im Potenial

$V(x)$ gibt es sehr viele Punkte, mit denen das Teilchen einmal wechselwirken kann. Das bedeutet, dass es auch unendlich viele Ausbreitungskerne für die Bewegung eines Teilchens mit einer Wechselwirkung im Potential $V(x)$ gibt. Die Ausbreitungskerne für diese verschiedene Pfade enthalten jeweils die Ausbreitungskerne $K_0(x_f, x_c; t_f - t_c)$ und $K_0(x_c, x_i; t_c - t_i)$ für einzelne Pfadabschnitte eines Pfades und müssen nach den Feynmanschen Regeln aufsummiert werden. Damit ergibt sich für den Ausbreitungskern des Teilchens mit einer Wechselwirkung am Punkt x_c, t_c folgende Gleichung [Blau 2006/07, Feynman 1965]

$$K^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt_c \int_{-\infty}^{+\infty} dx_c \, K_0(x_f, x_c) V(x_c) K_0(x_c, x_i) \,. \tag{4.38}$$

Das Mehrfachintegral der Gleichung (4.38) gibt es nur in der Variante, für die die Bedingung $t_f > t_i$ gilt. Daher hat sie den Vorfaktor 1, wie auch die äquivalente Darstellung in (4.36) für die einfache Wechselwirkung an einem beliebigen Punkt x_c. Anhand Gleichung (4.38) kann man leicht die Ausbreitungskerne für beliebig viele Wechselwirkungen mit dem Potential V notieren. Für zwei Wechselwirkungen lautet der Ausbreitungskern

$$K^{(2)} = -\frac{1}{\hbar^2} \int d\tau_c \int d\tau_d K_0(x_f, x_c) V(x_c) K_0(x_c, x_d) V(x_d) K_0(x_d, x_i) \tag{4.39}$$

$$\text{mit } d\tau = dtdx$$

$$\text{und } \int d\tau = \int_{t_i}^{t_f} dt \int_{-\infty}^{+\infty} dx \tag{4.40}$$

und ein Vergleich mit der Gleichung (4.37), die auch einer doppelten Wechselwirkung entspricht, fällt auf, dass der Faktor in Gleichung (4.39) nicht 1/2 sondern 1 ist. Dies bedarf einer Erklärung. In Gleichung (4.37) ist explizit noch nicht zu erkennen, dass das Doppelintegral nur für den Fall $t_f > t_i$ gilt. Dazu zerlegt man das Doppelintegral in folgende Summe

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_f} \int_{t_i}^{t_f} dt_2 dt_1 \, V\Big(x(t_1), t_1\Big) \, V\Big(x(t_2), t_2\Big) = & \int_{t_i}^{t_f} \int_{s}^{t_f} dt_2 dt_1 \, V\Big(x(t_1), t_1\Big) \, V\Big(x(t_2), t_2\Big) \\ & + \int_{t_i}^{t_f} \int_{t_i}^{s} dt_2 dt_1 \, V\Big(x(t_1), t_1\Big) \, V\Big(x(t_2), t_2\Big) \end{aligned} \tag{4.41}$$

und auf der rechten Seite ist nicht ersichtlich, dass die Bedingung $t_f > t_i$ erfüllt sein muss. Eine Umkehrung der Integranden führt auf äquivalente Terme. Diese Umkehrung ist nicht zulässig, daher halbiert sich der Wert des so notierten Doppelintegrals für Pfade mit zwei Wechselwirkungen in (4.37). Es gilt die folgende Bedingung für alle weiteren Betrachtungen

$$K(x_f, x_i) = 0 \qquad \text{für } t_f < t_i \,. \tag{4.42}$$

Die Gleichung (4.39) für den Ausbreitungskern mit zwei Wechselwirkungen erfüllt ohne weitere Veränderung die Bedingung (4.42). Damit hat die Gleichung (4.39) als Vorfaktor eine 1.
Wie verhält es sich für beliebig viele Wechselwirkungen. Um eine Aussage machen zu können, wird die Situation mit drei Wechselwirkungen betrachtet. Drei Wechselwirkungen führen nach (4.37) auf ein Dreifachintegral

$$\int_{t_i}^{t_f}\int_{t_i}^{t_f}\int_{t_i}^{t_f} dt_1\, dt_2\, dt_3\, V[x(t_1), t_1]\; V[x(t_2), t_2]\, V[x(t_3), t_3] \tag{4.43}$$

bei der Integration über die Zeit t. Wenn man sich davon alle möglichen Varianten überlegt, dann sind dies $3! = 6$ Varianten. Aber nur eine erfüllt die Bedingung (4.42). Damit hat man als Vorfaktor $1/3!$ für diese Schreibweise. Daraus kann man schließen, dass der Vorfaktor in einer Schreibweise wie in (4.37) und (4.43) für N-Wechselwirkungen $1/N!$ ist. In der Schreibweise nach (4.38) und (4.39) ist nur noch der Pfad angegeben, der bereits die Bedingung (4.39) erfüllt, weshalb der Vorfaktor hier wieder 1 ist. Die Schreibweise wie (4.38) und (4.39) bietet außerdem den Vorteil, dass man den Pfad des Teilchens intuitiver versteht.

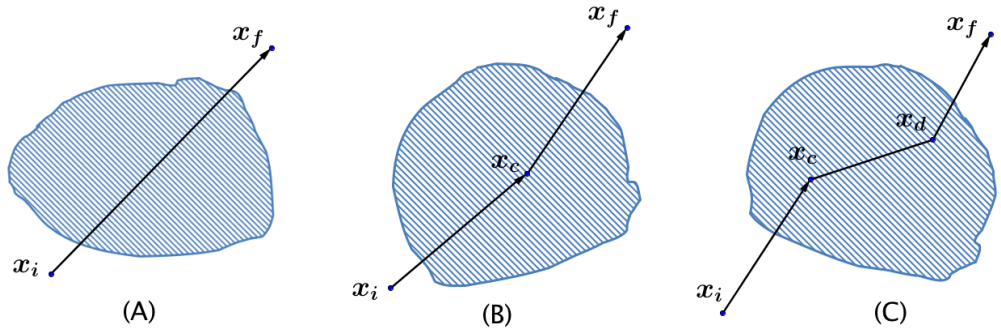


Abbildung 4.2: Darstellung der Ausbreitungskerne - Bild (A) freies Teilchen, Bild (B) Wechselwirkung des Teilchens an einem beliebigen Punkt x_c, Bild (C) Wechselwirkung des Teilchens an zwei Punkten x_c und x_d

Im folgenden wird gezeigt, wie die Ausbreitungskerne aus Abbildung (4.2) formal notiert werden, wenn sich ein Teilchen mit Wechselwirkungen Potential U vom Punkt x_i nach x_f ausbreitet

$$
\begin{aligned}
K_V(x_f, x_i) &= K_0(x_f, x_i) + K^{(1)}(x_f, x_i) + K^{(2)}(x_f, x_i) ... + K^{(N)}(x_f, x_i) \\
K_0(x_f, x_i) &= 0 \qquad \text{für } t_f < t_i \\
K^{(1)}(x_f, x_i) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt_c \int_{-\infty}^{+\infty} dx_c K_0(x_f, x_c) V(x_c) K_0(x_c, x_i) \\
K^{(2)}(x_f, x_i) &= -\frac{1}{\hbar^2} \int_{t_i}^{t_f} dt_c \int_{-\infty}^{+\infty} dx_c \int_{t_i}^{t_f} dt_d \int_{-\infty}^{+\infty} dx_d K_0(x_f, x_c) V(x_c) K_0(x_c, x_d) \\
&\qquad V(x_d) K_0(x_d, x_i)
\end{aligned}
\tag{4.44}
$$

und wird angenommen, dass das Teilchen durch das viel kleinere Potential V gestreut bzw. gestört wird. Auf diese Überlegungen wird im folgenden Kapitel Bezug genommen, wenn das Integral zur Bestimmung des Ausbreitungskernes K_V hergeleitet wird.

4.5 Die Bestimmung des Ausbreitungskerns K_V

Den Ausbreitungskern eines Teilchens $K_V(x_f, x_i; t_f - t_i)$ kann man wie bereits festgestellt als Sume von Ausbreitungskernen von Wegen mit verschieden vielen Wechselwirkungen verstehen. Im folgenden Fall soll dies für zwei Wechselwirkungen gezeigt werden, d.h. Ausbreitungskerne mit drei oder mehr Wechselwirkungen werden nicht betrachet. Um die Schreibweise zu vereinfachen, wird an die Vereinbarung zu den Integrationsvariablen (4.40) erinnert. Der Ausbreitungskern lautet dann [Feynman 1965]

$$\begin{aligned} K_V(x_f, x_i; t_f - t_i) =& K_0(x_f, x_i; t_f - t_i) + K^{(1)}(x_f, x_i; t_f - t_i) + \\ & K^{(2)}(x_f, x_i; t_f - t_i) + ... \\ =& K_0(x_f, x_i; t_f - t_i) \\ & - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_c \, K_0(x_f, x_c; t_f - t_c) V(x_c) K_0(x_c, x_i; t_c - t_i) \\ & - \frac{1}{\hbar^2} \int \int d\tau_c d\tau_d \left[K_0(x_f, x_c; t_f - t_c) V(x_c) \right. \\ & \left. K_0(x_c, x_d; t_c - t_d) V(x_d) K_0(x_d, x_i; t_d - t_i) \right] + ... \end{aligned} \tag{4.45}$$

und man sieht, dass alle Terme der Wechselwirkungen $i/\hbar \int d\tau_c K_0(x_f, x_c; t_f - t_c) V(x_c)$ enthalten. Diesen Teil kann man herausheben und man erhält die Gleichung

$$\begin{aligned} K_V(x_f, x_i; t_f - t_i) =& K_0(x_f, x_i; t_f - t_i) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_c \, K_0(x_f, x_c; t_f - t_c) V(x_c) \\ & \left\{ K_0(x_c, x_i; t_c - t_i) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_d \left[K_0(x_f, x_c; t_f - t_c) V(x_c) \right. \right. \\ & \left. \left. K_0(x_c, x_d; t_c - t_d) V(x_d) K_0(x_d, x_i; t_d - t_i) \right] + ... \right\}, \end{aligned} \tag{4.46}$$

in der der Ausdruck in der geschwungenen Klammer die gleiche Form wie die Terme der rechten Seite von (4.45) hat. Allerdings ist in Gleichung (4.46) die Wegstrecke von Anfangspunkt x_i nur bis zum letzen Wechselwirkungspunkt x_c. Der Weg der geschweiften Klammer endet also vor dem letzten Wechselwirkungspunkt x_c. Damit kann man anstelle der geschweiften Klammer den

Ausbreitungskern $K_V(x_c, x_i; t_c - t_i)$ schreiben

$$K_V(x_f, x_i; t_f - t_i) = K_0(x_f, x_i; t_f - t_i) - \frac{i}{\hbar} \int d\tau_c \, K_0(x_f, x_c; t_f - t_c) V(x_c) K_V(x_c, x_i; t_c - t_i) \, . \tag{4.47}$$

Dabei wurde für diesen Ausbreitungskern der Index V gewählt, weil sich das Teilchen auf vielen verschiedenen Wegen unter Wechselwirkungen mit dem Potential $V(x)$ zum Punkt x_c und damit nicht als freies Teilchen bewegt. Die Gleichung (4.47) kann physikalisch als Ausbreitung eines Teilchens auf zwei alternativen Wegen

$$\begin{aligned} &\text{Bewegung ohne Wechselwirkung } K_0(x_f, x_i; t_f - t_i) \\ &\text{Bewegung mit einer/mehreren Wechselwirkungen } -\frac{i}{\hbar} \int d\tau_c \Big[K_0(x_f, x_c; t_f - t_c) \\ &\qquad V(x_c) K_V(x_c, x_i; t_c - t_i) \Big] \end{aligned}$$

verstanden werden. Der letzte Wechselwirkungspunkt x_c kann irgendwo im Raum im Zeitintervall t_i und t_f liegen, daher muss über alle möglichen Pfade mit einem Wechselwirkungspunkt x_c zum Zeitpunkt t_c integriert werden, also über τ_c wie in (4.40) vereinbart.

4.6 Die Störungsentwicklung für die Wellenfunktion

Bisher wurden die Ausbreitungskerne K_V für die Bewegung eines Teilchen vom Punkt x_i zum Punkt x_f unter Einfluss eines Potentials $V(x)$ betrachtet. Es gibt Situationen in denen die Kenntnis über die Herkunft eines Teilchens nicht interessiert, sondern nur die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen an einem Punkt im Raum zu treffen. Diese Kenntnis erlangt man durch den Betrag des Amplitudenquadrats einer Wellenfunktion. Die Amplitude einer Wellenfunktion an einem Punkt x_f kann man aus dem Ausbreitungskern eines Teilchens zwischen zwei Zeiten t_i, t_f und einer Wellenfunktion zum Zeitpunkt t_i ableiten. Aus den bisherigen Überlegungen ergibt sich dafür ein Integral [Feynman 1965]

$$\psi(x_f, t_f) = \int dx_i \, K_V(x_f, x_i; t_f - t_i) \phi(x_i, t_i) \, , \tag{4.48}$$

das die verschiedenen Pfade zum Punkt x_f enthält. Der Ausbreitungskern aus (4.47) kann mit Hilfe der Reihenentwicklung (4.45) für die Wellenfunktion

(4.48) wie folgt ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned}\psi(x_f,t_f) = &\int dx_i\, K_0(x_f,x_i;t_f-t_i)\phi(x_i,t_i)\\ &-\frac{i}{\hbar}\int\int d\tau_c\, dx_i\, K_0(x_f,x_c;t_f-t_c)V(x_c)K_0(x_c,x_i;t_c-t_i)\phi(x_i,t_i)\\ &-\frac{1}{\hbar^2}\int\int\int d\tau_c d\tau_d dx_i \Big[K_0(x_f,x_c;t_f-t_c)V(x_c)K_0(x_c,x_d;t_c-t_d)\\ &\qquad V(x_d)K_0(x_d,x_i;t_d-t_i)\phi(x_i,t_i)\Big]+\dots \quad . \end{aligned} \tag{4.49}$$

Die erste Zeile in Gleichung (4.49) ergibt die Wellenfunktion $\phi(x_f,t_f)$ eines freien bzw. ungestörten Teilchens zur Zeit t_f. Das gleiche gilt für die folgenden Terme, allerdings ist der Endpunkt nicht x_f sondern x_c, x_d und so weiter. Damit kann man den Ansatz (4.49) noch etwas vereinfachen

$$\begin{aligned}\psi(x_f,t_f) =&\phi(x_f,t_f)-\frac{i}{\hbar}\int d\tau_c\, K_0(x_f,x_c;t_f-t_c)V(x_c)\phi(x_c,t_c)\\ &-\frac{1}{\hbar^2}\int\int d\tau_c d\tau_d \Big[K_0(x_f,x_c;t_f-t_c)V(x_c)K_0(x_c,x_d;t_c-t_d)\\ &\qquad V(x_d)\phi(x_d,t_d)\Big]+\dots, \end{aligned} \tag{4.50}$$

die als Bornentwicklung der Wellenfunktion ψ bezeichnet wird. Dabei bezeichnet die erste Ordnung der Bornentwicklung die ersten beiden Terme von (4.50), also die Näherung der Wellenfunktion ψ mit einer Wechselwirkung. Je mehr Wechselwirkungen für die Näherung berücksichtigt werden, desto höher ist die Ordnung der Bornentwicklung, d.h. eine Bornentwicklung zweiter Ordnung berücksichtigt bereits zwei Wechselwirkungen.

4.7 Wechselwirkung mit einem Diracpotential

Im folgenden Abschnitt wird die Berechung eines Ausbreitungskerns für eine Wechselwirkung mit einem Deltapotential $V(x)=\lambda\delta(x)$ durchgerechnet,

$$\psi(x_f,t_f) = \phi(x_f,t_f)-\frac{i}{\hbar}\int d\tau_c\, K_0(x_f,x_c;t_f-t_c)\lambda\delta(x_c)\phi(x_c,t_c)+O(\lambda^2)\,, \tag{4.51}$$

dabei entspricht der Koeffizient λ der Stärke des Deltapotentials. Es ergibt sich mit

- der Wellenfunktion $\phi(x,t)=e^{ikx}e^{-\frac{i\hbar k^2 t}{2m}}$ und

- dem Ausbreitungskern für ein freies Teilchen (Anhang F)
  $\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f-t_c)}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{im(x_f-x_c)^2}{2\hbar(t_f-t_c)}}$

folgender Ansatz:

$$\begin{aligned}\psi(x_f,t_f) =& e^{ikx_f}e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}} \\ &- \frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt_c \int_{-\infty}^{+\infty} dx_c \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f-t_c)}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{im(x_f-x_c)^2}{2\hbar(t_f-t_c)}} \lambda\delta(x) e^{ikx_c} e^{-\frac{i\hbar k^2 t_c}{2m}} \\ &+ O(\lambda^2)\,. \end{aligned} \tag{4.52}$$

Die Berechnung des Intergrals mit der Integrationsvariablen x_c erfolgt unter Verwendung von Eigenschaften der Deltafunktion, das sind

- die Symmetrie $\delta(-x) = \delta(x)$ und
- die Reduktion bei der Multiplikation $f(x)\delta(x) = f(0)\delta(x)$.

Unter Anwendung dieser Eigenschaften der Diracfunktion ergibt sich für das Integral mit der Integrationsvariablen x_c

$$\begin{aligned}\psi(x_f,t_f) =& e^{ikx_f}e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}} \\ &- \frac{i\lambda}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt_c \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f-t_c)}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\,m\,x_f^2}{2\hbar(t_f-t_c)}} e^{-\frac{i\hbar k^2 t_c}{2m}} \\ &+ O(\lambda^2)\,. \end{aligned} \tag{4.53}$$

Um das Integral mit der Integrationsvariablen t_c berechnen zu können, muss man nun das Integral geschickt vervollständigen

$$\begin{aligned}\psi(x_f,t_f) =& e^{ikx_f}e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}} \\ &- \frac{i\lambda}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt_c \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f-t_c)}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\,m\,x_f^2}{2\hbar(t_f-t_c)}} e^{-\frac{i\hbar k^2(t_c-t_f)}{2m}} e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}} \\ &+ O(\lambda^2)\,, \end{aligned} \tag{4.54}$$

so dass die Exponenten ein vollständiges Quadrat bilden. Die konstanten Glieder des Integrals, also jene ohne die Variable t_c können vor das Integral gezogen

werden und gemeinsame Terme herausgehoben werden

$$\psi(x_f,t_f) = e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}}\Bigg[e^{ikx_f} - \frac{i\lambda}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt_c \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f-t_c)}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\,m\,x_f^2}{2\hbar(t_f-t_c)}} e^{-\frac{i\hbar k^2(t_c-t_f)}{2m}} + O(\lambda^2)\Bigg]. \tag{4.55}$$

Ein Wechsel der Integrationsvariablen bringt eine weitere Vereinfachung für die Berechnung des Integrals, dabei werden folgende Konventionen

$$\begin{aligned} t_f - t_c &= \tau \\ -dt_c &= d\tau \end{aligned} \tag{4.56}$$

verwendet. Die Integrationsgrenzen werden dann für die Differenz $t_f - t_c$ gewählt. Diese Differenz kann unter der Annahme, dass $t_f > t_c$ ist, die Werte Null bis unendlich annehmen. Damit erhält man nach der Substitution der Integrationsvariablen

$$\psi(x_f,t_f) = e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}}\Bigg[e^{ikx_f} - \frac{i\lambda}{\hbar}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_0^{\infty} d\tau \left(\frac{1}{\tau}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i\,m\,x_f^2}{2\hbar\tau}} e^{-\frac{i\hbar k^2\tau}{2m}} + O(\lambda^2)\Bigg], \tag{4.57}$$

um auf ein Gaussches Intergral hinzuarbeiten. Im folgenden wird nur das Integral nach τ betrachtet. Um das Integral zu lösen, wurde in einer Integraltabelle ein vergleichbares Integral gesucht und auf die Situation angepasst. Zuerst wird aber durch Einfügen einer Sprungfunktion die untere Integrationsgrenze

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau \left(\frac{1}{\tau}\right)^{\frac{1}{2}} \Theta(\tau) e^{\frac{i\,m\,x_f^2}{2\hbar\tau}} e^{-\frac{i\hbar k^2\tau}{2m}} \tag{4.58}$$

transformiert. Dieses Integral muss man nun weiter bearbeiten, dazu wird die Methode der stationären Phase [Corput 1936, Jahns 2001, Feynman 1965] angewendet. Diese Methode ist anwendbar auf Integrale, die einen Funktionsterm enthalten, der sich bei schnellen Oszillationen aufhebt. Hier ist es die Phase der Exponentialfunktion $\phi(\tau)$. Bei langsamen Oszillationen kann man die Phase

der Exponentialfunktion als stationär ansehen. Es ergeben sich innerhalb eines Intervalls stationäre Punkte, um die das Integral entwickelt werden kann. Damit wird dann von der zweiten Funktion nur noch der Wert der Funktion um diese Entwicklungsstelle benötigt und man betrachtet nur noch das Integral einer komplexen Exponentialfunktion

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, e^{i\phi(\tau)} f(\tau) \approx \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, e^{i\phi(\tau)} f(\tau_0)\,, \tag{4.59}$$

dessen Exponent durch eine Tayloreihenentwicklung um den Wert τ_0 angenähert wird. Dafür lautet die Reihenentwicklung des Exponenten

$$\begin{aligned}
\phi(\tau) =& \phi(\tau_0) + \phi'(\tau_0)(\tau-\tau_0) + \frac{1}{2!}\phi''(\tau_0)(\tau-\tau_0)^2 + O(\tau_0^3) \\
\phi(\tau_0) =& \frac{m x_f^2}{2\hbar\tau_0} + \frac{\hbar k^2}{2m}\tau_0 \\
\phi'(\tau_0) =& -\frac{m x_f^2}{2\hbar\tau_0^2} + \frac{\hbar k^2}{2m} \\
\phi''(\tau_0) =& \frac{m x_f^2}{\hbar\tau_0^3}\,.
\end{aligned} \tag{4.60}$$

Um die Entwicklungsstelle τ_0 wird für die Funktion $\phi(\tau)$ ein Maximum erwartet, schließlich enthält diese einen linearen und umgekehrt proportionalen Anteil, d.h. die erste Ableitung kann Null gesetzt werden

$$\begin{aligned}
\phi'(\tau_0) = -\frac{m x_f^2}{2\hbar\tau_0^2} + \frac{\hbar k^2}{2m} =& 0 \qquad \rightarrow \qquad \frac{x_f^2}{\tau_0^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{m^2} \\
\tau_0 =& \begin{cases} \frac{m x_f}{\hbar k} & \text{wenn } x_f > 0 \\ -\frac{m x_f}{\hbar k} & \text{wenn } x_f < 0 \end{cases} \\
& \text{oder} \\
\tau_0 =& \frac{m|x_f|}{\hbar k}\,,
\end{aligned} \tag{4.61}$$

daraus lassen sich weitere Vereinfachungen für die Reihenentwicklung ableiten. Es ergibt sich für die beiden anderen Terme aus (4.60) eine weitere Vereinfa-

chung im Exponenten

$$\begin{aligned}\phi(\tau_0) =& \frac{mx_f^2}{2\hbar}\frac{\hbar k}{m|x_f|} + \frac{\hbar k^2}{2m}\frac{m|x_f|}{\hbar k} = k|x_f| \\ \phi'(\tau_0) =& 0 \\ \phi''(\tau_0) =& \frac{x_f^2}{\tau_0^2}\frac{m}{\hbar\tau_0} = \frac{\hbar^2k^2}{m^2}\frac{m}{\hbar}\frac{\hbar k}{m|x_f|} = \frac{\hbar^2k^3}{m^2|x_f|}\,,\end{aligned} \tag{4.62}$$

die insgesamt dazu führt, dass das Integral einer Gaußschen Funktion entsteht. Dies ist ein Standardintegral, dass sich in jeder Integraltabelle findet. Damit lautet das Integral

$$\begin{aligned}I_{|x_f|} =& \left(\frac{1}{\tau_0}\right)^{\frac{1}{2}} e^{i\phi(\tau_0)} \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{\frac{i\phi"(\tau_0)}{2}(\tau-\tau_0)^2} \\ =& \sqrt{\frac{\hbar k}{m|x_f|}} e^{i|x_f|k} \sqrt{\frac{2i\pi m^2|x_f|}{\hbar^2k^3}} = e^{i|x_f|k}\sqrt{\frac{2i\pi m}{\hbar k^2}}\,.\end{aligned} \tag{4.63}$$

Nun setzt man das Integral (4.63) in (4.57) und erhält

$$\begin{aligned}\psi(x_f,t_f) =& e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}}\left[e^{ikx_f} - \frac{i\lambda}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}}\sqrt{\frac{2i\pi m}{\hbar k^2}}\left(e^{ikx_f}+e^{-ikx_f}\right) + O(\lambda^2)\right] \\ =& e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}}\left[e^{ikx_f} - i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k}\left(e^{ikx_f}+e^{-ikx_f}\right) + O(\lambda^2)\right] \\ =& e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}}\left[e^{ikx_f} - i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k}e^{ix_fk} - i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k}e^{-ix_fk} + O(\lambda^2)\right] \\ =& e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}}\left[e^{ikx_f}\left(1 - i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k} + O(\lambda^2)\right) + e^{-ix_fk}\left(-i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k} + O(\lambda^2)\right)\right] \\ =& e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}}\left[e^{ikx_f}T + e^{-ix_fk}R\right].\end{aligned} \tag{4.64}$$

Es zeigt sich in (4.64), dass sich für die Reflexionsamplitude R folgerichtig eine nach links laufende also zur Quelle zurückreflektierte Wellenfunktion e^{-ikx_f} ergibt. Unter der getroffenen Annahme, dass die Wechselwirkungsamplitude $\lambda m/\hbar^2 k \ll 1$ und kleiner als die kinetische Energie der Teilchen ist, kann man erkennen, dass die berechneten Wahrscheinlichkeitsamplituden bis zur ersten Bornschen Näherung ausreichen, um die klassischen Bahnen zu beschreiben. Die

Wahrscheinlichkeitsamplituden für eine Wechselwirkung sowohl für die transmittierten als auch die reflektierten Teilchen ist wesentlich größer als die für zwei Wechselwirkungen. Damit haben die Amplituden der ersten Bornschen Näherung den Hauptanteil an den Pfaden im Vergleich zur klassischen Bewegung.
Im Folgenden sollen die mit der Eigenwertproblemmethode gefundenen Amplituden der Transmission T und der Reflexion R in eine Reihe zerlegt werden, um die Reihenentwicklung dann mit den Ergebnissen der Störungsmethode nach Feynman zu vergleichen. Die gefundenen Amplituden lauten

$$T = \frac{1}{1 + i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k}} \tag{4.65}$$

$$R = -\frac{i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k}}{1 + i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k}}\,. \tag{4.66}$$

Dabei kann man folgende Reihenentwicklung auf beide Koeffizienten

$$\begin{aligned}\frac{1}{1+q} =& 1 - q + q^2 - O(q^3)\\ &\text{mit } q = i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k}\end{aligned} \tag{4.67}$$

anwenden. Es ergeben sich dann für die Transmissions- T und Reflexionsamplitude R die folgenden Reihenentwicklungen bis zur zweiten Ordnung von λ

$$\begin{aligned}T =& \frac{1}{1 + i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k}} = 1 - i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k} + O(\lambda^2)\\ R =& -\frac{i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k}}{1 + i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k}} = -i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k}T = -i\frac{\lambda m}{\hbar^2 k} + O(\lambda^2)\,.\end{aligned} \tag{4.68}$$

Die Zerlegung der Lösung der Eigenwertproblemmethode für die Transmissionsamplitude T und die Reflektionsamplitude R in eine Reihe sind identisch mit den Amplituden, die bei der Störungsmethode nach Feynman gefunden wurden.

4.8 Berechnung der Amplituden an zwei Dirac-Potentialen

Dieses Beispiel sollte man nicht verwechseln mit der Wechselwirkung zweiter Ordnung eines Teilchens mit einem Dirac-Potential. Die beiden Dirac-Potentiale befinden sich im Abstand a zueinander. Das Potential an der Stelle $x = 0$ hat

die Stärke λ_1, jenes an der Stelle $x = a$ die Stärke λ_2.
Für die Berechnung einer Wellenfunktion ψ nach Feynman wird wieder folgender Ansatz eingesetzt, um Ausbreitungskerne bis zur zweiten Ordnung zu entwickeln

$$\begin{aligned}\psi(x_f, t_f) =& \phi(x_t, t_f) \\ &- \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_c \left[K_0(x_f, x_c; t_f - t_c)\Theta(t_f - t_c)V(x_c, t_c)\phi(x_c, t_c) \right] \\ &- \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_c \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_d \left[K_0(x_f, x_c; t_f - t_c)\Theta(t_f - t_c)V(x_c, t_c) \right. \\ &\left. K_0(x_c, x_d, t_c - t_d)\Theta(t_c - t_d)V(x_d, t_d)\phi(x_d, t_d) \right] + O(|V|^3)\,, \quad (4.69)\end{aligned}$$

d.h. mit bis zu zwei Wechselwirkungen eines Teilchens an den zwei Dirac-Potentialen. In Gleichung (4.69) sind folgende Terme enthalten

- Wellenfunktion eines freien Teilchens $\phi(x_t, t_f) = e^{ikx_f - \frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}}$
- Ausbreitungskern eines freien Teilchens $K_0(x_f, x_c; t_f - t_c)$
- Abkürzung der Intergrationsvariablen $d\tau_c = dt_c\, dx_c$
- Wechselwirkungspotential $V(x_c, t_c) = \lambda_n \delta(x - x_{WW})$ mit $n = \{1, 2\}$ und $x_{WW} = \{0, a\}$ sowie
- weitere Terme für Ausbreitungskerne höherer Ordnung $O(|V|^3)$.

Mit diesen Gedanken kann man nun die einzelnen Ausbreitungskerne bis zur zweiten Ordnung bestimmen, d.h. es werden bis zu zwei Wechselwirkungen pro Teilchen entlang eines Pfades berücksichtigt.
Für ein Teilchen ohne Wechselwirkung mit den beiden Diracpotentialen gilt der Ausbreitungskern eines freien Teilchens

$$K_0(x_f, x_c; t_f - t_c) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t_f - t_c)}} e^{\frac{im(x_f - x_c)^2}{2\hbar(t_f - t_c)}}\,. \quad (4.70)$$

Wenn ein Teilchen je eine Wechselwirkung mit einem der beiden Diracpotentiale eingeht, dann muss man eine Fallunterscheidung vornehmen, um auch die

reflektierten Teilchen zu erfassen. Damit ergibt sich für den Ausbreitungskern mit einer Wechselwirkung folgendes

$$
\begin{aligned}
K^{(1)} =& \underbrace{-\frac{i\lambda_1 m}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{\infty} dx_c\, e^{ik(x_f-x_c)}\delta(x_c)e^{ikx_c} - \frac{i\lambda_2 m}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{\infty} dx_c\, e^{ik(x_f-x_c)}\delta(x_c-a)e^{ikx_c}}_{\text{Transmission}} \\
& \underbrace{-\frac{i\lambda_1 m}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{\infty} dx_c\, e^{ik(x_c-x_f)}\delta(x_c)e^{ikx_c} - \frac{i\lambda_2 m}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{\infty} dx_c\, e^{ik(x_c-x_f)}\delta(x_c-a)e^{ikx_c}}_{\text{Reflexion}} \\
K^{(1)} =& \Big(-\frac{i\lambda_1 m}{\hbar^2 k} - \frac{i\lambda_2 m}{\hbar^2 k}\Big)e^{ikx_f} + \Big(-\frac{i\lambda_1 m}{\hbar^2 k} - \frac{i\lambda_2 m}{\hbar^2 k}e^{2ika}\Big)e^{-ikx_f}\,, \qquad (4.71)
\end{aligned}
$$

dabei wurde für die Lösung der Integrale wieder die Eigenschaft $f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x)$ verwendet. Im folgenden sind die Integrationsterme für die Ausbreitungskerne zweiter Ordnung notiert

$$
\begin{aligned}
K^{(2)} =& \underbrace{-\frac{m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4 k^2}\int_{-\infty}^{\infty} dx_c \int_{-\infty}^{\infty} dx_d e^{ik(x_f-x_d)}\delta(x_d-a)e^{ik(x_d-x_c)}\delta(x_c)e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Transmission mit } x_c<x_d} \\
& \underbrace{-\frac{m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4 k^2}\int_{-\infty}^{\infty} dx_c \int_{-\infty}^{\infty} dx_d e^{ik(x_f-x_d)}\delta(x_d)e^{ik(x_c-x_d)}\delta(x_c-a)e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Transmission mit } x_c>x_d} \\
& \underbrace{-\frac{m^2\lambda_1^2}{\hbar^4 k^2}\int_{-\infty}^{\infty} dx_c e^{ik(x_f-x_c)}\delta(x_c)e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Transmission mit doppelter WW bei } x_c} \\
& \underbrace{-\frac{m^2\lambda_2^2}{\hbar^4 k^2}\int_{-\infty}^{\infty} dx_d e^{ik(x_f-x_d)}\delta(x_d-a)e^{ik(x_d-x_i)}}_{\text{Transmission mit doppelter WW bei } x_d}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&- \frac{m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4 k^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx_c \int_{-\infty}^{\infty} dx_d e^{ik(x_d-x_f)}\delta(x_d-a)e^{ik(x_d-x_c)}\delta(x_c)e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Reflexion mit } x_c<x_d} \\
&- \frac{m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4 k^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx_c \int_{-\infty}^{\infty} dx_d e^{ik(x_d-x_f)}\delta(x_d)e^{ik(x_d-x_c)}\delta(x_c-a)e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Reflexion mit } x_c>x_d} \ldots \\
&- \frac{m^2\lambda_1^2}{\hbar^4 k^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx_c e^{ik(x_c-x_f)}\delta(x_c)e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Reflexion mit doppelter WW bei } x_c} \\
&- \frac{m^2\lambda_2^2}{\hbar^4 k^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx_d e^{ik(x_d-x_f)}\delta(x_d-a)e^{ik(x_d-x_i)}}_{\text{Reflexion mit doppelter WW bei } x_d}, \qquad (4.72)
\end{aligned}
$$

denen das entsprechende Verhalten zu geschrieben wurde. Unter Verwendung der Eigenschaften der Deltadistribution lassen sich die Integrale über dx berechnen, wie sie bereits bei (4.52) zu (4.53) angewendet wurden. Allerdings bleibt im Falle der Deltadistribution an der Stelle $x = a$ ein konstanter Phasenfaktor übrig und es ergibt sich

$$
\begin{aligned}
K^{(2)} =& \left[- \frac{m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4 k^2} - \frac{m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4 k^2} e^{2ika} - \frac{m^2\lambda_1^2}{\hbar^4 k^2} - \frac{m^2\lambda_2^2}{\hbar^4 k^2} \right] e^{ik(x_f-x_i)} \\
& \left[- \frac{m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4 k^2} e^{2ika} - \frac{m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4 k^2} e^{2ika} - \frac{m^2\lambda_1^2}{\hbar^4 k^2} - \frac{m^2\lambda_2^2}{\hbar^4 k^2} e^{2ika} \right] e^{ik(-x_f-x_i)} \\
=& \left[- \frac{m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4 k^2} - \frac{m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4 k^2} e^{2ika} - \frac{m^2\lambda_1^2}{\hbar^4 k^2} - \frac{m^2\lambda_2^2}{\hbar^4 k^2} \right] e^{ik(x_f-x_i)} \\
& \left[- \frac{2m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4 k^2} e^{2ika} - \frac{m^2\lambda_1^2}{\hbar^4 k^2} - \frac{m^2\lambda_2^2}{\hbar^4 k^2} e^{2ika} \right] e^{ik(-x_f-x_i)}, \qquad (4.73)
\end{aligned}
$$

darin bedeuten für $x_c = 0$ und $x_d = a$

- $-\frac{m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4 k^2}$ Transmission an zwei Wechselwirkungen an zwei verschiedenen Stellen mit $x_c < x_d$,
- $-\frac{m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4 k^2} e^{2ika}$ Transmission an zwei Wechselwirkungen an zwei verschiedenen Stellen mit $x_c > x_d$,

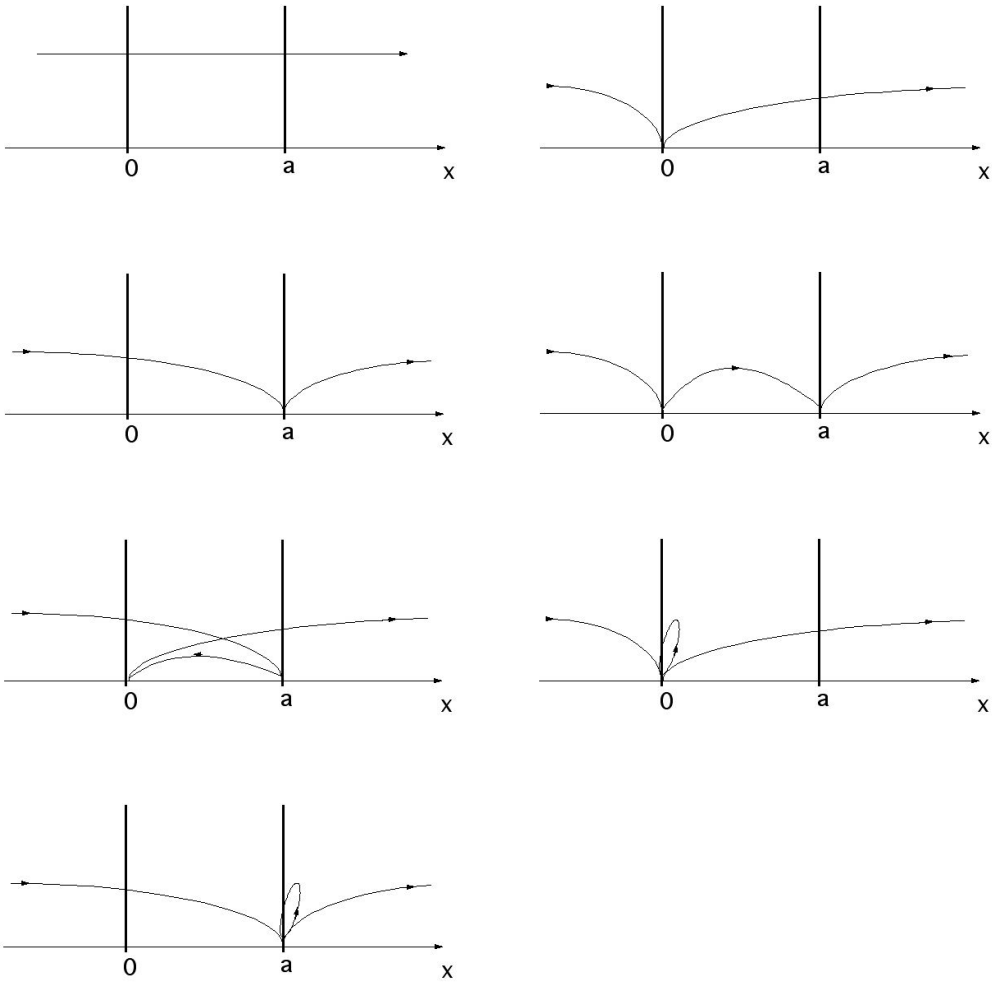


Abbildung 4.3: Interpretation der Transmissionsamplituden T für die Wechselwirkung mit zwei Diracpotentialen

- $-\frac{m^2\lambda_1^2}{\hbar^4 k^2}$ Transmission mit zwei Wechselwirkungen an der Stelle x_c,
- $-\frac{m^2\lambda_2^2}{\hbar^4 k^2}e^{2ika}$ Transmission mit zwei Wechselwirkungen an der Stelle x_d,
- $-\frac{m^2\lambda_1^2}{\hbar^4 k^2}$ Reflexion mit zwei Wechselwirkungen an der Stelle x_c,

- $-\frac{2m^2\lambda_1\lambda_2}{\hbar^4k^2}e^{2ika}$ Reflexion mit zwei Wechselwirkungen an zwei Stellen und
- $-\frac{m^2\lambda_2^2}{\hbar^4k^2}e^{2ika}$ Reflexion mit zwei Wechselwirkungen an der Stelle x_d.

Ein Vergleich mit den gefundenen Termen aus der Reihenentwicklung der konventionellen Rechenweise (Anhang G) zeigt, dass sich in jeder Ordnung die gleichen Terme ergeben. In den Abbildungen (4.3) und (4.4) sind Interpretationen dieser Terme graphisch dargestellt. Wie bereits bei der Wechselwirkung eines Teilchens mit einem Dirac-Potential im Kapitel (4.7) diskutiert, tragen die Ausbreitungskerne der ersten Ordnung also mit einer Wechselwirkung am meisten zu den Pfaden für die klassische Bewegung bei, wenn angenommen wird, dass die Stärke des Potentials kleiner als eins und kleiner als die kinetische Energie der Teilchen ist.

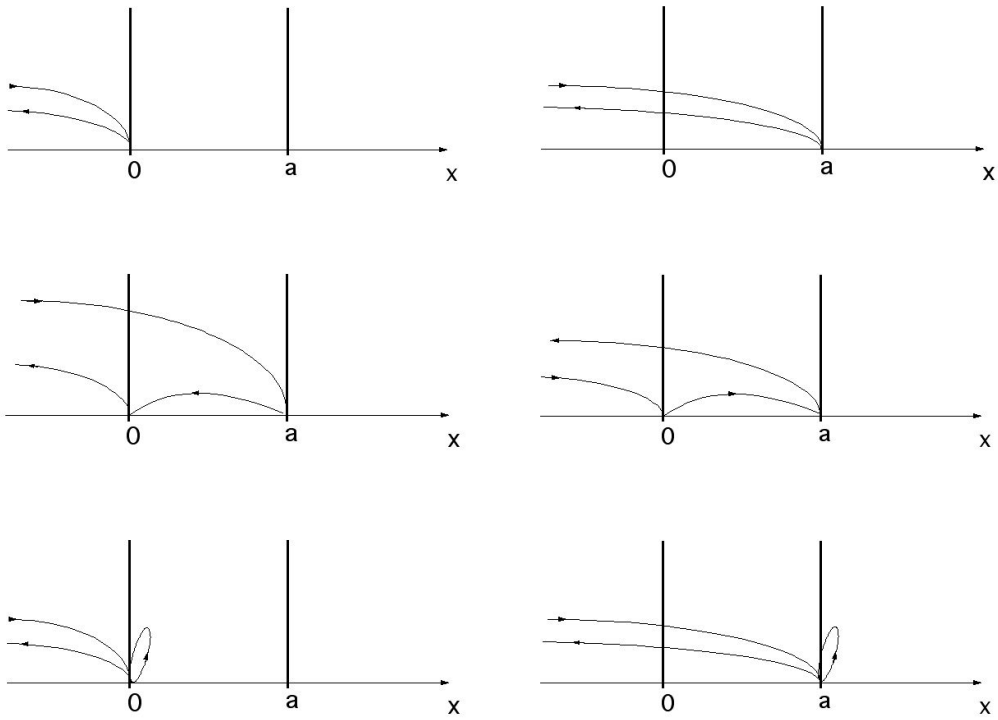


Abbildung 4.4: Interpretation der Reflexionsamplituden R für die Wechselwirkung mit zwei Diracpotentialen

4.9 Berechnung der Amplituden an einer Potentialbarriere

Vor der Berechnung der Wechselwirkung an der Potentialbarriere $V\Theta(x)\Theta(a-x)$ sei noch einmal daran erinnert, dass die Punkte x_c zur Zeit t_c und x_d zu t_d die Wechselwirkungspositionen sind, während der Punkt x_f zur Zeit t_f der Detektionspunkt ist. Diese Festlegung gilt es bei der Berechnung der Integrale nach der Zeit zu beachten. Während die räumliche Position x_f kleiner als die räumliche Position x_c sein kann, gilt für die Zeiten, dass $t_f > t_c > t_d > t_i$ erfüllt sein muss. Das bedeutet, dass die Zeit nicht umkehrbar ist. Daher werden für die Zeiten Sprungfunktionen

$$\begin{aligned}\psi(x_f,t_f) =&\phi(x_t,t_f)\\ &-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} d\tau_c \left[K_0(x_f,x_c;t_f-t_c)\Theta(t_f-t_c)V(x_c,t_c)\phi(x_c,t_c)\right]\\ &-\frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} d\tau_c \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_d \Big[K_0(x_f,x_c;t_f-t_c)\Theta(t_f-t_c)V(x_c,t_c)\\ &K_0(x_c,x_d,t_c-t_d)\Theta(t_c-t_d)V(x_d,t_d)\phi(x_d,t_d)\Big]+O(|V|^3) \qquad (4.74)\end{aligned}$$

eingefügt. In (4.74) haben die Terme folgende Bedeutung

- Wellenfunktion eines freien Teilchens $\phi(x,t) = e^{ikx-\frac{i\hbar k^2 t}{2m}}$,
- Ausbreitungskern eines freien Teilchens $K_0(x_f,x_c;t_f-t_c)$,
- Zusammenfassung der Integrationsvariablen $d\tau_c = dt_c\,dx_c$,
- Wechselwirkungspotential $V(x_c,t_c) = |V|(x_c)\Theta(x)\Theta(a-x) = |V|(x_c)c_{[0,a]}$ und
- Ausbreitungskerne höherer Ordnung $O(|V|^3)$.

Zuerst wird aus (4.74) das Integral für eine Wechselwirkung nach dt_c und dann nach dx_c aufgelöst. Dabei wird die Sprungfunktion $\Theta(t_f-t_c)$ unter Veränderung der Integrationsgrenzen der Zeit

$$\begin{aligned}K^{(1)} =&-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt_c \int_{-\infty}^{\infty} dx_c \left[K_0(x_f,x_c;t_f-t_c)\Theta(t_f-t_c)V(x_c,t_c)\phi(x_c,t_c)\right]\\ =&-\frac{i}{\hbar}\int_0^a dx_c e^{ikx_c}V(x_c)\int_0^{\infty} dt_c \left[\sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t_f-t_c)}}e^{\frac{im(x_f-x_c)^2}{2\hbar(t_f-t_c)}-\frac{i\hbar k^2 t_c}{2m}}\right] \qquad (4.75)\end{aligned}$$

umgewandelt. Das Integral nach dt_c wird erst geschickt erweitert, dann wird eine Substitution mit $\tau = t_f - t_c$ und $d\tau = -dt_c$ vorgenommen und die Integrationsgrenzen

$$\begin{aligned} I(t_c) =& e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}} \int_0^\infty dt_c \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t_f - t_c)}} e^{\frac{im(x_f - x_c)^2}{2\hbar(t_f - t_c)} + \frac{i\hbar k^2 (t_f - t_c)}{2m}} \\ I(\tau) =& e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}} \int_0^\infty d\tau \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\tau}} e^{\frac{im(x_f - x_1)^2}{2\hbar\tau} + \frac{i\hbar k^2 \tau}{2m}} \end{aligned} \tag{4.76}$$

getauscht. Die Exponentialfunktion in (4.76) reagiert schneller auf die Änderung von τ als die Wurzel, daher dominiert diese das Integral. Der Exponent wird in eine Taylor-Reihe bis zur zweiten Ordnung entwickelt

$$\begin{aligned} \phi(\tau) =& \frac{m(x_f - x_c)^2}{2\hbar\tau} + \frac{\hbar k^2 \tau}{2m} \\ \phi'(\tau) =& \frac{m(x_f - x_c)^2}{2\hbar\tau^2} + \frac{\hbar k^2}{2m} \\ \phi''(\tau) =& -\frac{m(x_f - x_c)^2}{\hbar\tau^3}, \end{aligned} \tag{4.77}$$

weil die zweite Ableitung mit dem Term τ^{-3} stark abfällt. Außerdem zielt die Umformung wieder auf die Bildnung eines Gaußschen Integrals, das in jeder Integraltafel enthalten ist. Die Funktion $\phi(\tau)$ in (4.77) enthält sowohl einen gebrochen rationalen Term als auch einen linearen Term mit der Größe τ, daher muss es bei der Reihenentwicklung um die Stelle τ_0 eine Extremstelle geben. Die Reihenentwicklung des Exponenten um die Stelle τ_0, die eine Extremstelle ist, lautet

$$\begin{aligned} \phi(\tau_0) =& \frac{m(x_f - x_c)^2}{2\hbar\tau_0} + \frac{\hbar k^2 \tau_0}{2m} \\ \phi'(\tau_0) =& -\frac{m(x_f - x_c)^2}{2\hbar\tau_0^2} + \frac{\hbar k^2}{2m} = 0 \\ \phi''(\tau_0) =& \frac{m(x_f - x_c)^2}{\hbar\tau_0^3} \\ & \text{mit} \tau_0 = \frac{m|x_f - x_c|}{\hbar k} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\phi(\tau_0) =& \frac{k|x_f - x_c|}{2} + \frac{k|x_f - x_c|}{2} = k|x_f - x_c| \\
\phi'(\tau_0) =& 0 \\
\phi''(\tau_0) =& \frac{\hbar^2 k^3}{m^2|x_f - x_c|} \\
\phi(\tau_0) =& k|x_f - x_c| + \frac{\hbar^2 k^3}{2m^2|x_f - x_c|}(\tau - \tau_0)^2 + O(\tau_0^3). \qquad (4.78)
\end{aligned}$$

Setzt man diese Reihenentwicklung in das Integral ein, dann ergibt sich folgendes

$$\begin{aligned}
I(\tau) =& e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}} \int_0^\infty d\tau \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar\tau_0}} e^{ik|x_f - x_c| + \frac{i\hbar^2 k^3}{2m^2|x_f - x_c|}(\tau - \tau_0)^2 + O(\tau_0)^3} \\
=& e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m} + ik|x_f - x_c|} \sqrt{\frac{k}{2i\pi|x_f - x_c|}} \int_0^\infty d\tau\, e^{\frac{i\hbar^2 k^3}{2m^2|x_f - x_c|}(\tau - \tau_0)^2 + O(\tau_0)^3} \\
=& e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m} + ik|x_f - x_c|} \sqrt{\frac{k}{2i\pi|x_f - x_c|}} \sqrt{\frac{2i\pi m^2|x_f - x_c|}{\hbar^2 k^3}} + O(\tau_0)^3 \\
=& e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m} + ik|x_f - x_c|} \frac{m}{\hbar k} + O(\tau_0^3)\,, \qquad (4.79)
\end{aligned}$$

die in den Ansatz für die Bestimmung des Ausbreitungskerns

$$K^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^a dx_c e^{ikx_1} V(x_c) e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m} + ik|x_f - x_c|} \frac{m}{\hbar k} \qquad (4.80)$$

eingesetzt wird. Im Fall der Potentialbarriere ist davon auszugehen, dass die Stärke des Potentials sich weder zeitlich noch räumlich ändert und als positiv angenommen wird. Damit kann man den Ausbreitungskern für eine Wechselwirkung noch einmal umformen

$$K^{(1)} = -\frac{imV}{\hbar^2 k} e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}} \int_0^a dx_c e^{ikx_1} e^{ik|x_f - x_c|} \qquad (4.81)$$

und erhält dabei einen sehr nützlichen Vorfaktor, der mittels Feynmanscher Regeln auch für mehrere Wechselwirkungen verwendet wird. Die Berechnung der Ausbreitungskerne höherer Ordnung vereinfacht sich somit. In Gleichung (4.81) gibt es zwei Terme, die nicht vom Ort abhängig sind und daher auch nicht im Integral berücksichtigt werden müsssen. Diese Terme stehen für

- den Zeitentwicklungsterm $e^{-\frac{i\hbar k^2 t_f}{2m}}$ und
- die Wechselwirkungsamplitude $-\frac{imV}{\hbar^2 k}$.

Der Term der Wechselwirkungsamplitude ist für die Berechnung der Ausbreitungskerne von besonderer Bedeutung, weil die Wahrscheinlichkeitsamplituden entlang eines Weges multipliziert werden. I n diesem Fall vereinfacht sich dann das Integral des Ortes, schließlich kann davon ausgegangen werden, dass in der homogenen Potentialbarriere die Wirkung des Potentials auf das Teilchen überall die gleiche ist. Für die Wechselwirkungsamplitude ergibt sich als Vorfaktor

- $-\frac{imV}{\hbar^2 k}$ für eine Wechselwirkung,
- $-\frac{m^2V^2}{\hbar^4 k^2}$ für zwei Wechselwirkungen und
- $\frac{im^3V^3}{\hbar^6 k^3}$ für drei Wechselwirkungen.

Im folgenden wird nun die Berechnung der Ausbreitungskerne eines Teilchens mit bis zu zwei Wechselwirkungen durchgeführt. Begonnen wird mit dem Ausbreitungskern für ein transmittiertes Teilchen ohne Wechselwirkung

$$K_0(x_f, x_c; t_f - t_c) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t_f - t_c)}} e^{\frac{im(x_f - x_c)^2}{2\hbar(t_f - t_c)}}, \tag{4.82}$$

d.h. ein freies Teilchen. Nun wird der Ausbreitungskern für Teilchen mit einer Wechselwirkung bestimmt. Durch die Fallunterscheidung sind sowohl die Reflexions- als auch die Transmissionsamplitude (Anhang H)

$$\begin{aligned} K^{(1)} &= -\frac{imV}{\hbar^2 k} \int_0^a dx_c \left[\underbrace{e^{ik(x_f - x_c)} e^{ik(x_c - x_i)}}_{\text{transmittiert}} + \underbrace{e^{-ik(x_f - x_c)} e^{ik(x_c - x_i)}}_{\text{reflektiert}} \right] \\ &= \underbrace{-\frac{imaV}{\hbar^2 k}}_{\text{Transmission}-} e^{ik(x_f - x_i)} \underbrace{-\frac{imV}{\hbar^2 k^2} e^{ika} \sin ka}_{\text{Reflexionsamplitude}} e^{ik(-x_f - x_i)} \end{aligned} \tag{4.83}$$

bereits enthalten. Die Wellenfunktionen zeigen an, in welche Richtung sich das Teilchen bewegt und legen daher die Bedeutung der Amplituden fest. In allen bisher betrachteten Beispielen wurde angenommen, dass sich die Quelle links vom Detektor befindet. Daraus folgt, dass ein transmittiertes Teilchen positive Werte $x_f > 0$ für den Detektor in (4.83) hat. Der Ausbreitungskern für zwei

Wechselwirkungen wird als nächstes bestimmt. Damit wird gezeigt, welche Wirkung die Vereinfachung durch die Anwendung der Feynmanschen Regeln hat. Auch dieser Ausbreitungskern für zwei Wechselwirkungen enthält wieder Terme der Reflexions- und Transmissionsamplituden

$$
\begin{aligned}
K^{(2)} = -\frac{m^2V_0^2}{\hbar^4k^2}\Bigg[& \underbrace{\int_0^a dx_c \int_{x_c}^a dx_d e^{ik(x_f-x_d)}e^{ik(x_d-x_c)}e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Transmission mit } x_c<x_d} \\
& + \underbrace{\int_0^a dx_c \int_0^{x_c} dx_d e^{ik(x_f-x_d)}e^{-ik(x_d-x_c)}e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Transmission mit } x_c>x_d} \\
& + \underbrace{\int_0^a dx_c \int_{x_c}^a dx_d e^{-ik(x_f-x_d)}e^{ik(x_d-x_c)}e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Reflexion mit } x_c<x_d} \\
& + \underbrace{\int_0^a dx_c \int_0^{x_c} dx_d e^{-ik(x_f-x_d)}e^{-ik(x_d-x_c)}e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Reflexion mit } x_c>x_d} \Bigg] .
\end{aligned} \tag{4.84}
$$

Nach der Berechnung der Integrale (Anhang H) ergeben sich folgende Lösungen für den Ausbreitungskern mit zwei Wechselwirkungen

$$
\begin{aligned}
K^{(2)} = -\frac{m^2V_0^2}{\hbar^4k^2}\Bigg[& e^{ik(x_f-x_i)}\frac{a^2}{2} \\
& + e^{ik(x_f-x_i)}\Big(-\frac{1}{4k^2}e^{2ika} - \frac{ia}{2k} + \frac{1}{4k^2}\Big) \\
& + e^{ik(-x_f-x_i)}\Big(-\frac{ia}{2k}e^{2ika} + \frac{1}{4k^2}e^{2ika} - \frac{1}{4k^2}\Big) \\
& + e^{ik(-x_f-x_i)}\Big(-\frac{ia}{2k}e^{2ika} + \frac{1}{4k^2}e^{2ika} - \frac{1}{4k^2}\Big) ,
\end{aligned} \tag{4.85}
$$

die die folgende Bedeutung haben

- $-\frac{a^2m^2V_0^2}{2\hbar^4k^2}e^{ik(x_f-x_i)}$ Transmission mit zwei Wechsel an einer Stelle,

- $-\frac{iam^2V_0^3}{2\hbar^4k^3}e^{ik(x_f-x_i)}$ Transmission mit zwei Wechselwirkungen an zwei Stellen mit $x_i < x_f$,

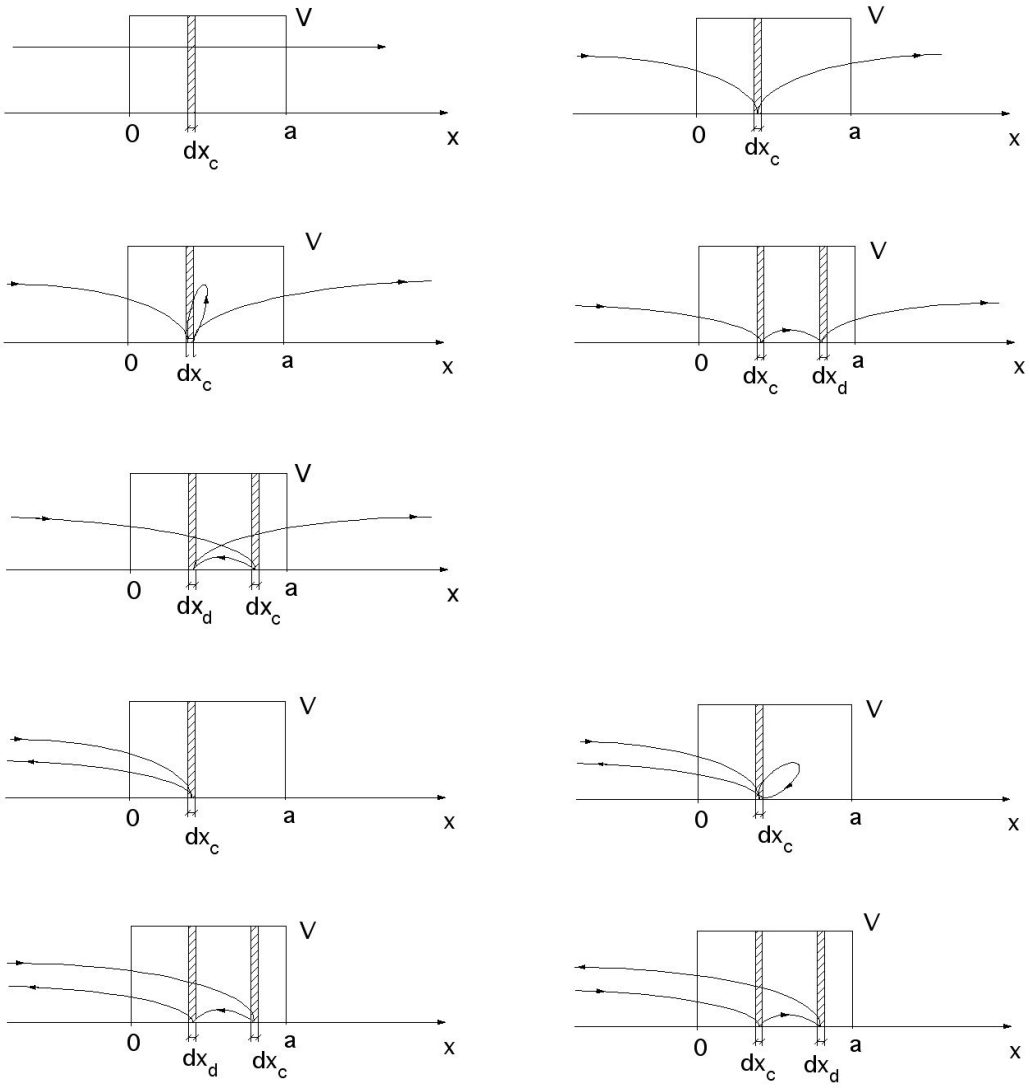


Abbildung 4.5: Interpretation der Reflexions- R und Transmissionsamplituden T bei der Wechselwirkung mit einer Potentialbarriere

Feynmanentwicklung	**Konventionell nach Reihenzerlegung**	**Deutung**
1	1	Transmission und keine Wechselwirkung
$-\frac{imV_0}{\hbar^2 k^2} e^{ika} \sin ka$	$-\frac{imV_0}{\hbar^2 k^2} e^{ika} \sin ka$	Reflexion und eine Wechselwirkung
$-\frac{iamV_0}{\hbar^2 k}$	$-\frac{iamV_0}{\hbar^2 k}$	Transmission und eine Wechselwirkung
$-\frac{a^2 m^2 V_0^2}{2\hbar^4 k^2}$	$-\frac{a^2 m^2 V_0^2}{2\hbar^4 k^2}$	Transmission und zwei Wechselwirkungen an einem Punkt
$\frac{iam^2 V_0^2}{\hbar^4 k^3} e^{2ika}$	$\frac{iam^2 V_0^2}{\hbar^4 k^3} e^{2ika}$	Reflexion und zwei Wechselwirkungen an zwei Punkten
$-\frac{iam^2 V_0^2}{2\hbar^4 k^3}$	$-\frac{iam^2 V_0^2}{2\hbar^4 k^3}$	Transmission und zwei Wechselwirkungen an zwei Punkten
$\frac{im^2 V_0^2}{2\hbar^4 k^4} e^{ika} \sin ka$	$\frac{im^2 V_0^2}{2\hbar^4 k^4} e^{ika} \sin ka$	Transmission und zwei Wechselwirkungen an zwei Punkten
$-\frac{im^2 V_0^2}{\hbar^4 k^4} e^{ika} \sin ka$	$-\frac{im^2 V_0^2}{\hbar^4 k^4} e^{ika} \sin ka$	Reflexion und zwei Wechselwirkungen an einem Punkt

Tabelle 4.1: Vergleich und Deutung der Amplituden

- $+\frac{im^2V_0^2}{2\hbar^4k^4}e^{ika}\sin ka\, e^{ik(x_f-x_i)}$ Transmission mit zwei Wechselwirkungen an zwei stellen mit $x_i > x_f$,
- $+\frac{iam^2V_0^3}{\hbar^4k^3}e^{2ika}e^{ik(-x_f-x_i)}$ Reflexion mit zwei Wechselwirkungen an zwei Stellen und
- $-\frac{im^2V_0^2}{\hbar^4k^4}e^{ika}\sin ka\, e^{ik(-x_f-x_i)}$ Reflexion mit zwei Wechselwirkungen an einer Stelle.

Die Abbildung (4.5) zeigt die graphische Deutung der Reflexions- und Transmissionsamplitude mit bis zu zwei Wechselwirkungen an einer Potentialbarriere. In der Tabelle (4.1) sind die Terme der Wahrscheinlichkeitsamplituden mit bis zu zwei Wechselwirkungen aus der konventionellen Berechnung (Anhang I) und aus der Berechnung nach Feynman gegenübergestellt. Im Grunde diente die Bestimmung des Ausbreitungskerns zweiter Ordnung nur als Bestätigung der Äquivalenz der beiden Betrachtungsweisen der Quantentheorie. Denn dieser Ausbreitungskern trägt weniger zum klassischen Pfad bei als der Ausbreitungskern erster Ordnung.

4.10 Rutherfordstreuung mittels Pfadintegral

Als nächstes Beispiel wird der Streuversuch nach Rutherford mit Hilfe der Pfadintegrale und der Störungsmethode betrachtet. Dazu wird angenommen, dass das Teilchen von einer Quelle am Punkt $\vec{x}_i$ ausgesendet und in einem Detektor am Punkt $\vec{x}_f$ empfangen werden kann, wobei diese Punkte wie auch alle weiteren Punkte zum Raum $\mathbb{R}^3$ gehören. Ein wesentlicher Unterschied zu den bisherigen Beispielen ist, dass auf Grund der dünnen Materialschicht nur eine Wechselwirkung des Teilchen mit einem noch genauer zu beschreibenden Potential eines Atoms $V(\vec{r})$ stattfindet. Wegen dieser Annahmen ist es völlig ausreichend die Pfadintegrale nur bis zur ersten Bornnäherung zu berechnen [Feynman 1965].
Des Weiteren entspricht der Ausbreitungskern für ein Teilchen ohne Wechselwirkung $K_0(\vec{x}_d, \vec{x}_i)$ mit dem Streuzentrum einem Pfadintegral, das im Punkt $\vec{x}_d$ endet. Dieser Punkt $\vec{x}_d$ ist genauso weit vom Streuzentrum entfernt wie der Ort des Detektors $\vec{x}_f$, wie in Abbildung (4.6) dargestellt. Dieser Ausbreitungskern wird erst bei der Bestimmung des Wirkungsquerschnittes benötigt und geht dann als Ausbreitungskern eines freien, nicht gestreuten Teilchens von der Quelle $\vec{x}_i$ zu einem Punkt $\vec{x}_d$ ein.
Von Interesse ist der Ausbreitungskern einer Wechselwirkung an einem Punkt

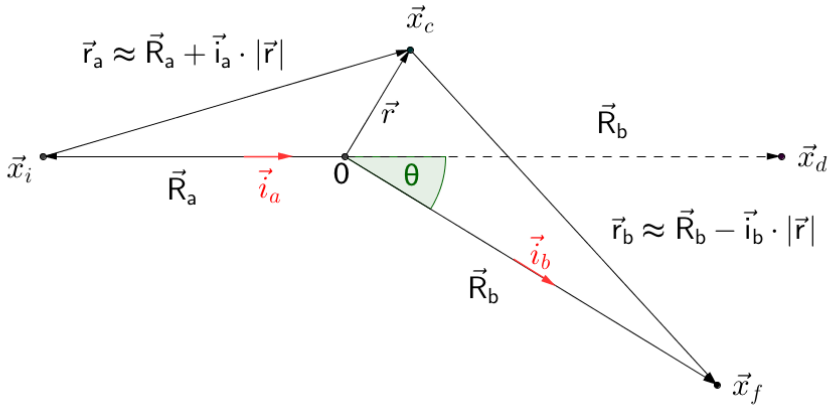


Abbildung 4.6: Streuung eines Teilchens an einem Streuzentrum bei 0 mittels Pfadintegral

$\vec{x}_c$ um das Streuzentrum herum, welches im Ursprung lokalisiert ist. Die Abstände von der Quelle und dem Detektor zum Streuzentrum sind viel größer als der Radius des Streuzentrums. Damit ergibt sich für den Ausbreitungskern $K^{(1)}(\vec{x}_f, \vec{x}_i)$ folgender Ansatz [Feynman 1965]

$$\begin{aligned} K^{(1)}(\vec{x}_f, \vec{x}_i) &= -\frac{i}{\hbar} \int K_0(\vec{x}_f, \vec{x}_c) V(\vec{r}) K_0(\vec{x}_c, \vec{x}_i) d\tau_c \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^T \left(\frac{m}{2\pi i\hbar(T-t)} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left[\frac{i|\vec{r}_a|^2 m}{2\hbar(T-t)} \right] V(\vec{r}) \\ &\qquad \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left[\frac{i|\vec{r}_b|^2 m}{2\hbar t} \right] d^3r\, dt\,, \end{aligned} \tag{4.86}$$

darin ist der Abstand $\vec{r}$ vom Streuzentrum der Parameter, um den sich die einzelnen Pfade unterscheiden, wenn das Teilchen von $\vec{x}_i$ nach $\vec{x}_f$ an $\vec{x}_c$ gestreut wird. Dazu wurde beispielgebend ein Pfad eingezeichnet, der um das Streuzentrum herumführt (Abb. 4.6). Das gestreute Teilchen nimmt einen beliebigen vom Parameter $\vec{r}$ abhängigen Weg entlang der beiden Teilstrecken $\vec{r}_a$ und $\vec{r}_b$, die sich aus den Abständen vom Streuzentrum zur Quelle $\vec{R}_a$, vom Streuzentrum zum Detektor $\vec{R}_b$ und vom Streuzentrum zum Wechselwirkungspunkt $\vec{r}$ ergeben. Als erstes wird das Integral nach der Zeit dt gelöst

$$K^{(1)}(\vec{x}_f,\vec{x}_i) = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{\frac{5}{2}} T \int\limits_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{1}{|\vec{r}_a|}+\frac{1}{|\vec{r}_b|}\right)\exp\left[\frac{i\Big(|\vec{r}_a|+|\vec{r}_b|\Big)^2 m}{2\hbar T}\right] V(\vec{r})d^3r\,. \tag{4.87}$$

Die Streupfade $\vec{r}_a$ und $\vec{r}_b$ werden mit Hilfe des Streuparameters $\vec{r}$ und den Abständen $|\vec{R}_a|$ und $|\vec{R}_b|$

$$\begin{aligned} K^{(1)}(\vec{x}_f,\vec{x}_i) = &-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{\frac{5}{2}} T\left(\frac{1}{|\vec{R}_a|}+\frac{1}{|\vec{R}_b|}\right) \\ &\int\limits_{\mathbb{R}^3} \exp\left[\frac{i\Big(|\vec{R}_a+\vec{i}_a\cdot r|+|\vec{R}_b-\vec{i}_b\cdot r|\Big)^2 m}{2\hbar T}\right] V(\vec{r})d^3r \end{aligned} \tag{4.88}$$

ausgedrückt. Als Bedingung sind die Abstände $\vec{R}_a$ und $\vec{R}_b$ viel größer als $\vec{r}$ angenommen, daher hat der Abstand $\vec{r}$ des Wechselwirkungspunktes nur im Exponenten einen Einfluss, der schneller auf eine kleine Änderungen reagiert. Daher ergibt sich für die Abstände nach Auflösung des Binoms im Exponenten

$$\Big(|\vec{R}_a|+|\vec{R}_b|\Big)^2 + 2\Big(|\vec{R}_a|+|\vec{R}_b|\Big)\Big(|\vec{i}_a-\vec{i}_b|\cdot r\Big) + \underbrace{\Big(|\vec{i}_a-\vec{i}_b|\cdot r\Big)^2}_{\text{vernachlässigbar}}, \tag{4.89}$$

so dass sich Ausbreitungskern weiter vereinfacht zu

$$\begin{aligned} K^{(1)}(\vec{x}_f,\vec{x}_i) = &-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{\frac{5}{2}} T\left(\frac{1}{|\vec{R}_a|}+\frac{1}{|\vec{R}_b|}\right)\exp\left[\frac{i\Big(|\vec{R}_a|+|\vec{R}_b|\Big)^2 m}{\hbar T}\right] \\ &\int\limits_{\mathbb{R}^3} \exp\left[\frac{i\Big(|\vec{R}_a|+|\vec{R}_b|\Big)\Big(|\vec{i}_a-\vec{i}_b|\cdot r\Big)m}{2\hbar T}\right] V(\vec{r})d^3r\,, \end{aligned} \tag{4.90}$$

dessen Terme sich noch weiter vereinfachen lassen. Vor der Lösung des Intergrals sind einige physikalische Überlegungen notwendig. Dazu zählt, dass die Geschwindigkeit, mit der das Teilchen von der Quelle zum Detektor gelangt, $v = (|\vec{R}_a|+|\vec{R}_b|)/T$ ist. Weitere physikalische Überlegungen sind

- Impuls des Teilchens zum Streuzentrum $\vec{p}_a = mv\vec{i}_a$
- Impuls des Teilchens zum Detektor $\vec{p}_b = mv\vec{i}_b$
- Impulsänderung des Teilchens $\vec{q} = \vec{p}_a - \vec{p}_b$

Der Ansatz für den Ausbreitungskern lautet dann

$$K^{(1)}(\vec{x}_f, \vec{x}_i) = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{\frac{5}{2}} \frac{v}{T^{\frac{1}{2}}|\vec{R}_a||\vec{R}_b|}\exp\left[\frac{i\,u^2 mT}{2\hbar}\right]\int\limits_{\mathbb{R}^3}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\vec{q}\cdot\vec{r}\right]V(\vec{r})d^3r \tag{4.91}$$

und man erhält nach Einsetzen der Größe

$$v(\vec{q}) = \int^{r}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\vec{q}\cdot\vec{r}\right]V(\vec{r})d^3r \tag{4.92}$$

für den Ausbreitungskern mit einer Wechselwirkung

$$K^{(1)}(\vec{x}_f, \vec{x}_i) = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{\frac{5}{2}} \frac{v}{T^{\frac{1}{2}}R_aR_b}\exp\left[\frac{i\,v^2 mT}{2\hbar}\right]v(\vec{q})\,. \tag{4.93}$$

Das Quadrat des Ausbreitungskerns in erster Bornnäherung entspricht der Wahrscheinlichkeit ein gestreutes Teilchen in einer Volumenseinheit anzutreffen. Der Ausbreitungskern $K^{(1)}$ ist bereits viel kleiner ist als der Ausbreitungskern für ein freies, also nicht wechselwirkendes Teilchen. Daher muss eine Blende eingesetzt werden, um den Strahl der einströmenden Teilchen derart zu optimieren, dass der Teilchenstrom ohne Wechselwirkungen möglichst nur zum Punkt $\vec{x}_d$ gelangt und die geraden Wege ohne Wechselwirkung von der Quelle $\vec{x}_i$ zum Detektor $\vec{x}_f$ maximal reduziert werden. Außerdem genügt die Bestimmung des Ausbreitungskerns erster Ordnung, weil Ausbreitungskerne höherer Ordnung keinen wesentlichen Beitrag zur Amplitude erbringen, wie in Kapitel (4.7) besprochen. Für die Bestimmung des Amplitudenquadrates wird noch der komplex konjugierte Ausdruck

$$K^{(1)*}(\vec{x}_f, \vec{x}_i) = \frac{i}{\hbar}\left(-\frac{m}{2\pi i\hbar}\right)^{\frac{5}{2}} \frac{v}{T^{\frac{1}{2}}R_aR_b}\exp\left[-\frac{i\,v^2 mT}{2\hbar}\right]v(\vec{q}) \tag{4.94}$$

benötigt und das Amplitudenquadrat der gestreuten Teilchen lautet

$$\begin{aligned}|K^{(1)}(\vec{x}_f, \vec{x}_i)|^2 &= K^{(1)}(\vec{x}_f, \vec{x}_i)\cdot K^{(1)*}(\vec{x}_f, \vec{x}_i)\\ &= \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^5 \frac{v^2}{TR_a^2R_b^2}|\,v(\vec{q})\,|^2 = \frac{P(x_i)}{\text{Volumenseinheit}}\,.\end{aligned} \tag{4.95}$$

Für Teilchen, die nicht gestreut werden und im Punkt $\vec{x}_d$ ankommen, erhält man für den Ausbreitungskern für freie Teilchen

$$K_0(\vec{x}_d, \vec{x}_i) = \int\limits_{\mathbb{R}^3} \int\limits_0^T \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i|\vec{R}_a+\vec{R}_b|^2 m}{2\hbar t}} dt\, d^3r \tag{4.96}$$

und den dazu konjugiert komplexen Ausdruck nach Auflösung des Zeitintegrals

$$K_0^*(\vec{x}_d, \vec{x}_i) = \left(\frac{i\,m}{2\pi\hbar T}\right)^{\frac{3}{2}} \int\limits_{\mathbb{R}^3} e^{\frac{-i|\vec{R}_a+\vec{R}_b|^2 m}{2\hbar T}} d^3r\,. \tag{4.97}$$

Das Amplitudenquadrat für die Ausbreitung eines freien Teilchens zum Detektor $\vec{x}_d$ ist

$$\begin{aligned} |K_0(\vec{x}_d, \vec{x}_i)|^2 &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 \left(\frac{1}{T}\right)^3 \\ &\qquad \text{mit } v = \frac{|\vec{R}_a| + |\vec{R}_b|}{T} \Rightarrow T^2 = \frac{(|\vec{R}_a| + |\vec{R}_b|)^2}{v^2} \\ |K_0(\vec{x}_d, \vec{x}_i)|^2 &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 \frac{v^2}{T(R_a + R_b)^2} = \frac{P(x_d)}{\text{Volumenseinheit}}\,. \end{aligned} \tag{4.98}$$

Nun wird die relative Wahrscheinlichkeit gebildet, die sich aus zwei Termen zusammensetzt, einen geometrischen Teil und dem partiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{P(x_f)}{P(x_d)} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\,v(\vec{q})|^2 \frac{(R_a + R_b)^2}{R_a^2 R_b^2} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{(R_a + R_b)^2}{R_a^2 R_b^2}\,, \tag{4.99}$$

wobei $R_b^2 d\Omega$ der Wirkungsquerschnitt der gestreuten Teilchen ist. Damit in dieser Gleichung der Wirkungsquerschnitt enthalten ist, ist nicht unmittelbar erkennbar, aber man kann sich überlegen, dass an der Fläche $d\sigma$ nicht alle Teilchen in Richtung des Flächenelements $R_b^2 d\Omega$ gestreut werden. In der Tat wird nur ein kleiner Teil aller ausgesendeten Teilchen im Winkel θ gestreut. Aus (4.99) folgt eine Gleichung für den partiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\,v(\vec{q})|^2\,, \tag{4.100}$$

die ausgewertet werden muss und dann mit dem konventionellen Ergebnis der Rutherfordstreuung verglichen wird.
Im nächsten Schritt wird folgendes Integral gelöst

$$\begin{aligned} v(\vec{q}) =& \frac{4\pi\hbar}{q}\int\limits_0^\infty r\left(\sin\frac{qr}{\hbar}\right)\frac{Z_1Z_2e^2}{r}d^3r = \frac{4\pi\hbar}{q}Z_1Z_2e^2\int\limits_0^\infty \frac{e^{\frac{iqr}{\hbar}}-e^{-\frac{iqr}{\hbar}}}{2i}e^{-\varepsilon r}d^3r \\ =& \frac{4\pi\hbar}{q}\frac{Z_1Z_2e^2}{2i}\frac{e^{\frac{iqr}{\hbar}-\varepsilon r}}{\frac{iq}{\hbar}-\varepsilon} - \frac{e^{-\frac{iqr}{\hbar}-\varepsilon r}}{-\frac{iq}{\hbar}-\varepsilon}\Bigg|_0^\infty = \frac{4\pi\hbar}{q}\frac{Z_1Z_2e^2}{2i}\left(\frac{1}{\frac{iq}{\hbar}}+\frac{1}{\frac{iq}{\hbar}}\right) \\ =& \frac{4\pi\hbar}{q}\frac{Z_1Z_2e^2}{2i}\frac{2i\hbar}{q} = \frac{4\pi\hbar^2Z_1Z_2e^2}{q^2}\,, \end{aligned} \tag{4.101}$$

wobei $q = 2p\sin\frac{\theta}{2}$ ist. Durch die Bildung des Quadrats $|\,v(\vec{q})|^2$ kann die Gleichung (4.100) aufgelöst werden

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} =& \frac{4Z_1^2Z_2^2e^4m^2}{q^4} = \frac{Z_1^2Z_2^2e^4}{16\frac{m^2v^4}{4}\sin^4\frac{\theta}{2}} = \frac{Z_1^2Z_2^2e^4}{16E^2\sin^4\frac{\theta}{2}} \\ \frac{d\sigma}{d\Omega} =& \left(\frac{Z_1Z_2e^2}{4E}\right)^2\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{2}}\,, \end{aligned} \tag{4.102}$$

so dass man den Wirkungsquerschnitt für dieses Problem erhält [Feynman 1965]. Es zeigt sich wie schon bei den anderen Beispielen, dass man wieder das Ergebnis der konventionellen Methode mit Hilfe der Pfadintegrale erhält. Die Betrachtung von Vorgängen in der Quantentheorie aus konventioneller Sicht ist äquivalent zur Betrachtung nach Feynman. Wenn gleich beide Rechnungen viel mathematisches Geschick erfordern, so zeigen die Ergebnisse der Betrachtung nach Feynman sehr anschaulich das Verhalten von Quantenobjekten. Die Ergebnisse der konventionellen Betrachtung lassen solche Einblicke nicht unmittelbar zu. Daher erscheint es sinnvoll, die Betrachtungen der Quantentheorie auf Feynman aufzubauen, um den Grad der Abstraktion zu reduzieren.

4.11 Reflexion und Brechung

4.11.1 Der harmonische Oszillator und seine Energieeigenwerte

Der harmonische Oszillator ist wichtig für das Verständnis der Ausführungen zur Feynmanschen Beschreibung der Brechung und Reflexion mit Hilfe des elektromagnetischen Feldes und dessen Energiepakete den Photonen. Im zweiten Schritt werden dann die Maxwellgleichung auf die in der Teilchenphysik häufig verwendeten Heaviside Einheiten umgewandelt und die Energiestromdichte

sowie Impulsstromdichte in Heaviside Einheiten angegeben. Als dritter Schritt wird das freie elektromagnetische Feld betrachtet. Dazu werden die Maxwellgleichungen in die Wellengleichungen überführt. Dann wird eine Welle in eine Fourierreihe entwickelt, um den Zusammenhang mit dem harmoischen Oszillator zu zeigen. Mit Hilfe der Fourierreihe werden Energie und Impuls einer einzelnen Fourierkomponente berechnet, die die Grundlage für die Superposition von vielen verschieden Fourierkomponenten als ungekoppelte harmonische Oszillatoren zu verstehenden Wellen sind. Im darauffolgenden Abschnitt wird mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die Quantisierung des elektromagnetischen Feldes bestehend aus harmonischen Oszillatoren vorgenommen. Bevor die Brechung und Reflexion im Feynmanschen Sinn mit dem Zeigerformalismus beschrieben werden, wird das Feld abschließend aus Photonen mit Impuls und Polarisation zusammengesetzt, wobei Photonen im Gegensatz zu Elektronen auch den gleichen Einteilchenzustand belegen können. Schließlich sind Photonen Bosonen und unterliegen der Bose-Einstein Statistik.
Wie bereits bei den anderen quantenmechanischen Beispielen muss für die Betrachtung des harmonischen Oszillators die Eigenwertgleichung aufgestellt werden. Als erster Schritt wird dazu der Hamiltonoperator für diese Situation

$$\begin{aligned} V(x) =& \frac{m\omega^2}{2}x^2 \\ \hat{H} =& \hat{T}(P) + \hat{V}(X) = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{X}^2}{2} \end{aligned} \tag{4.103}$$

aufgestellt. In der klassischen Mechanik ergibt sich aus dieser Hamiltonfunktion als Wert der Grundzustandsenergie Null. Wie man auch leicht am potentiellen Anteil $\hat{V}(X)$ der Hamiltonfunktion erkennen kann. Der potentielle Anteil ist eine homogene quadratische Funktion, die ihr Minium bei $x = 0$ und $\hat{V}(X) = 0$ hat. Quantenphysikalisch ist dies wegen der Unschärferelation von Impuls (kinetische Energie) und Ort (potentielle Energie) nicht möglich. Es soll nun gezeigt werden, dass die Grundzustandsenergie E_0 der Eigenfunktion ψ_0 des quantenmechanischen Hamiltonoperators einen bestimmten Wert wegen der Unschärferelation von verschwindenden Impulserwartungswert $\langle P\rangle_{\psi_0} = 0$ und verschwindenden Ortserwartungswert $\langle X\rangle_{\psi_0} = 0$ nicht unterschreiten kann. Das Eigenwertproblem lautet

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_0 =& E_0\psi_0 \\ \langle\hat{H}\rangle_\psi =& \frac{1}{2m}\langle P^2\rangle_\psi + \frac{m\omega^2}{2}\langle X^2\rangle_\psi \,. \end{aligned} \tag{4.104}$$

Mit der Unschärferelation kann man nun den Impuls durch den Ort substituieren und erhält

$$\begin{aligned}\langle \hat{H} \rangle_\psi \geq & \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \frac{1}{\langle X^2 \rangle_\psi} + \frac{m\omega^2}{2}\langle X^2 \rangle_\psi \\ = & \frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{\langle X^2 \rangle_\psi} + \frac{m\omega^2}{2}\langle X^2 \rangle_\psi \,. \end{aligned} \tag{4.105}$$

Um die Grundzustandsenergie für diese Situation zu ermitteln, wird eine weitere Substitution $u = \langle X^2 \rangle_\psi$ vorgenommen

$$E(u) = \frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{u} + \frac{m\omega^2}{2}u \tag{4.106}$$

und dann die erste Ableitung dieser neuen Funktion Null [Bertlmann 2008] gesetzt

$$\begin{aligned}\dot{E}(u) = & -\frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{u^2} + \frac{m\omega^2}{2} = 0 \\ u_{\min} = & \frac{\hbar}{2m\omega} \\ E(u_{\min}) = & \frac{\hbar\omega}{2} \,. \end{aligned} \tag{4.107}$$

Alle Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators sind daher größer oder gleich dem eben gefundenen Grundzustandsenergiewert $E(u_{\min})$. Als nächstes wird die Eigenfunktion ψ_0 für diesen Grundzustandsenergieeigenwert $E(u_{\min}) = E_0$ durch einige algebraische Überlegungen bestimmt. Für die folgenden Betrachtungen wird dabei angenommen, dass sich das Potential $V(X)$ mit der Zeit nicht ändert. Damit lautet das Eigenwertproblem in Ortsdarstellung mit Implusoperator P als Differentialoperator wie folgt [Bertlmann 2008]:

$$\hat{H}\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \right)\psi(x) = E\psi(x) \,. \tag{4.108}$$

Durch Umformen den Einsatz Ortsoperators $X = m\omega x$ sowie des bereits bekannten Impulsoperators im Ortsraum $P = -i\hbar\frac{d}{dx}$ erhält man für das Eigenwertproblem folgendes

$$\begin{aligned}\frac{1}{2m}\Big(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2} + m^2\omega^2x^2 \Big)\psi(x) = & E\psi(x) \\ \frac{1}{2m}\left[\Big(-i\hbar\frac{d}{dx} \Big)^2 + m^2\omega^2x^2 \right]\psi(x) = & E\psi(x) \\ \frac{1}{2m}\Big(P^2 + X^2 \Big)\psi(x) = & E\psi(x) \,, \end{aligned} \tag{4.109}$$

in der letzten Zeile ist eine komplexe binomische Formel enthalten

$$a^2 - b^2 = (a+b)(a-b) \rightarrow \underbrace{a^2 + b^2 = (a+ib)(a-ib)}_{\text{komplexes Binom}} . \tag{4.110}$$

was mit einer komplexen binomischen Formel gemeint ist. Nach Anwendung auf das Eigenwertproblem erhält man folgende Situation [Bertlmann 2008]

$$\frac{1}{2m} \underbrace{\left(P^2 + X^2\right)}_{(X+iP)(X-iP)} \psi(x) = E\psi(x) \,, \tag{4.111}$$

die aber scheinbar zu einem Widerspruch führt. Das Problem liegt beim Kommutator $[X,\, P]$, der in der Quantenmechanik nicht verschwindet. Führt man die Rechnung umgekehrt aus, erhält man ein anderes Ergebnis als in der Anfangssituation. Dies wird durch die Einführung zwei weiterer Operatoren im nächsten Schritt aufgehoben und man erhält folgende Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m}\{(X+iP)(X-iP)\}\psi(x) &= E\psi(x) \\ \frac{1}{2m}\{X^2 + P^2 + i\Big(XP - PX\Big)\}\psi(x) &= E\psi(x) \\ \frac{1}{2m}\{X^2 + P^2 + i[X,\, P]\}\psi(x) &= E\psi(x) \,, \end{aligned} \tag{4.112}$$

die den nicht verschwindenden Kommutator von Ort und Impuls $i[\bar{X}, \hat{P}]$. Durch die Einführung zwei weiterer Operatoren wird die physikalische Bedeutung dieser Gleichung verständlich. Die beiden Operatoren sind [Bertlmann 2008]

$$\begin{aligned} a =& (X + iP) = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega x + ip) = \text{der Vernichtungsoperator und} \\ a^\dagger =& (X - iP) = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega x - ip) = \text{der Erzeugungsoperator.} \end{aligned} \tag{4.113}$$

Im weiteren Verlauf der quantenmechanischen Betrachtung des harmonischen Oszillators wird die Bezeichung der Operatoren aufgezeigt. Durch Multiplikation unter Beachtung der Vertauschung (Anhang J) erhält man folgende Aus-

drücke

$$\begin{aligned} aa^\dagger =& \frac{1}{2m\omega\hbar}\Big[(m\omega X)^2 + P^2 - im(XP - PX)\Big] \\ =& \frac{1}{2m\omega\hbar}\Big[(m\omega X)^2 + P^2 - im\omega[XP]\Big] \\ a^\dagger a =& \frac{1}{2m\omega\hbar}\Big[(m\omega X)^2 + P^2 + im(XP - PX)\Big] \\ =& \frac{1}{2m\omega\hbar}\Big[(m\omega X)^2 + P^2 + im\omega[XP]\Big]\,, \end{aligned} \tag{4.114}$$

die beiden letzten Relationen kann man nun in den Hamiltonoperator einsetzen. Das Eigenwertproblem notiert man wie folgt [Bertlmann 2008]

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(x) =& E\psi(x) \\ \frac{1}{2m}\Big[P^2 + (m\omega X)^2\Big]\psi(x) =& E\psi(x) \end{aligned} \tag{4.115}$$

und mit $\frac{1}{m\omega\hbar}\Big[P^2 + (m\omega X)^2\Big] = a^\dagger a + aa^\dagger$ ergibt sich

$$\frac{\omega\hbar}{2}\Big(a^\dagger a + aa^\dagger\Big)\psi(x) = E\psi(x)\,. \tag{4.116}$$

Unter Verwendung von $[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = 1 \Rightarrow\ aa^\dagger = a^\dagger a + 1$ ergibt sich für das Eigenwertproblem

$$\begin{aligned} \frac{\omega\hbar}{2}\Big(2a^\dagger a + 1\Big)\psi(x) =& E\psi(x) \\ \omega\hbar\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)\psi(x) =& E\psi(x) \\ a^\dagger a\psi(x) =& \left(\frac{E}{\omega\hbar} - \frac{1}{2}\right)\psi(x)\,. \end{aligned} \tag{4.117}$$

Dieses Ergebnis muss weiter bearbeitet werden, um die Eigenfunktion ψ_0 für den Grundzustand zu finden. Durch Einführung des Besetzungszahloperators N mit den Eigenschaften [Bertlmann 2008, Basdevant 2002, Neufeld 2006/07]

$$\begin{aligned} N =& a^\dagger a \\ \Big[N, a^\dagger\Big] =& a^\dagger \\ \Big[N, a\Big] =& -a \end{aligned} \tag{4.118}$$

wird das Eigenwertproblem übersichtlicher. Durch Substitution des Besetzungszahloperators N in das Eigenwertproblem

$$\begin{aligned} H\psi_\nu(x) =& E_\nu \psi_\nu(x) \\ N\psi_\nu =& \nu\psi_\nu \end{aligned} \tag{4.119}$$

werden Eigenwerte dieses Operators gefunden, die eine weitere Behandlung des Energieeigenwertproblems erlauben. Die Analogie der beiden Gleichungen wird genutzt, um die Energieeigenwerte E_ν und den Zustandsvektor ψ_ν zu bestimmen.
Als nächstes werden die Eigenwerte ν zur Erfüllung der Gleichung (4.119) berechnet. Das Anwenden eines Skalarproduktes mit dem Zustandsvektor ψ_ν auf beiden Seiten der Gleichung (4.119) zeigt, dass im Grundzustand $\nu = 0$ der Zustandsvektor $a\psi_\nu$ auch Null sein muss

$$\begin{aligned} \nu\langle\psi_\nu|\psi_\nu\rangle =& \langle\psi_\nu|\nu\psi_\nu\rangle = \langle\psi_\nu|N\psi_\nu\rangle = \langle\psi_\nu|a^\dagger a\psi_\nu\rangle = \langle a\psi_\nu|a\psi_\nu\rangle \geq 0 \\ \nu = 0 \quad \rightarrow \quad & a\psi_0 = 0\,, \end{aligned} \tag{4.120}$$

wobei a der Vernichtungsoperator ist. Dabei zeigt sich auch, dass die Erwartungswerte der Energie für beliebige Zustände ψ_ν immer positiv sein müssen. Durch die Darstellung der Bedingung $a\psi_0 = 0$ im Orstraum wird der Impulsoperator als differentielles Glied ausgedrückt und es ergibt sich die folgende Differentialgleichung mit dem Vernichtungsoperator[2]

$$\begin{aligned} 0 =& a\psi_0 \\ 0 =& \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\left(m\omega x + i\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\psi_0 \\ 0 =& \left(\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{d}{dx}\right)\psi_0 \\ \psi_0 =& \mathcal{N} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ & \text{mit}\,\mathcal{N} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \\ \psi_0 =& \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\,, \end{aligned} \tag{4.121}$$

[2]Die Berechnung der Differentialgleichung und des Normierungsfaktors $\mathcal{N}$ sind ausführlich im Anhang K dargestellt.

damit wurde die Grundzustandswellenfunktion ψ_0 mit dem Besetzungszahloperator N und dem Eigenwert $\nu = 0$ gefunden. Mit dem gefundenen Grundzustandsvektor kann man durch Einsetzen in das anfängliche Eigenwertproblem $H\psi_0 = E_0\psi_0$ prüfen, dass sich die bereits gewonnene Grundzustandsenergie E_0 ergibt (Anhang K).
Im Folgenden werden nun aus dem Grundzustand alle weiteren Zustände hergleitet. Dazu wird zu erst betrachtet, wie der Operator $a^\dagger$ auf einen Zustand wirkt

$$\begin{aligned} Na^\dagger\psi_\nu =& \Big(a^\dagger N + a^\dagger\Big)\psi_\nu = a^\dagger\Big(N+1\Big)\psi_\nu = a^\dagger\Big(\nu+1\Big)\psi_\nu = \Big(\nu+1\Big)a^\dagger\psi_\nu \\ & \text{mit der Normierungsbedingung} \\ \langle a^\dagger\psi_\nu|a^\dagger\psi_\nu\rangle =& \langle\psi_\nu|\underbrace{aa^\dagger}_{a^\dagger a+1}\psi_\nu\rangle = \langle\psi_\nu|(N+1)\psi_\nu\rangle = \langle\psi_\nu|(\nu+1)\psi_\nu\rangle \\ =& (\nu+1)\underbrace{\langle\psi_\nu|\psi_\nu\rangle}_{1} \\ & \text{wegen dem Quadrat des Skalarprodukts folgt} \\ a^\dagger\psi_\nu =& \sqrt{\nu+1}\psi_{\nu+1} \end{aligned} \tag{4.122}$$

und es zeigt sich, dass angeregte Zustände durch die Anwendung des Operators $a^\dagger$ entstehen, der daher auch Erzeugunsoperator heißt. Durch mehrfache Anwendung des Erzeugunsoperators (Anhang J) gelangt man vom Grundzustand auf jeden beliebigen höhren Zustand

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}\Big(a^\dagger\Big)^n\psi_0\,. \tag{4.123}$$

Weiters ist es möglich, von einem angeregten Zustand in einen Energie niedrigeren Zustand zu gelangen. Dazu wird der Operator a auf einen Zustand ψ_ν angewendet und man erhält

$$\begin{aligned} Na\psi_\nu =& \Big(aN - a\Big)\psi_\nu = a\Big(N-1\Big)\psi_\nu = a\Big(\nu-1\Big)\psi_\nu = \Big(\nu-1\Big)a\psi_\nu \\ & \text{mit der Normierungsbedingung} \\ \langle a\psi_\nu|a\psi_\nu\rangle =& \langle\psi_\nu|\underbrace{a^\dagger a}_{N}\psi_\nu\rangle = \langle\psi_\nu|\underbrace{N\psi_\nu}_{\nu\psi_\nu}\rangle = \langle\psi_\nu|\nu\psi_\nu\rangle = \nu\underbrace{\langle\psi_\nu|\psi_\nu\rangle}_{1} \\ & \text{wegen dem Quadrat des Skalarprodukts folgt} \\ a\psi_\nu =& \sqrt{\nu}\psi_{\nu-1}\,, \end{aligned} \tag{4.124}$$

daher bezeichnet man den Operator a auch als Vernichtungsoperator. Zusammenfassend ergeben sich damit für das Eigenwertproblem $H\psi_n = E_n\psi_n$ des harmonischen Oszillators

- der Hamiltonoperator $H = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right)$, wobei $N = a^\dagger a$ der Besetzungszahloperator ist,
- die Energieeigenwerten $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$,
- die Zustandsvektoren$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$,
- der Grundzustandsvektor $\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ und
- die Grundzustandsenergie $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$.

Dabei ergeben sich Zustände mit konstanten Abständen zu den Nachbarzuständen, der genau der Energie $\hbar\omega$ entspricht. Mit Hilfe der Erzeugungs- oder Vernichtungsoperatoren kann man so zwischen den Anregungszuständen wechseln. Dabei nehmen die Zustände abwechselend gerade und ungerade Eigenfunktionen ψ_n an [Neufeld 2006/07].

4.11.2 Energiestromdichte und Impulsstromdichte in Heaviside Einheiten

Maxwells Leistung im 19. Jahrhundert war die Verbindung von elektrischen und magnetischen Feldern durch vier Gleichungen. Allerdings geht die Form der heute bekannten Maxwellgleichungen auf Hertz zurück. Hertz passte die Maxwellgleichungen an die durch Michelson und Morley bewiesene Absenz eines Lichtäthers so an, dass diese Wellengleichungen auch ohne ein Trägermedium auskommen [Rupp 2010]. Diese Gleichungen lauten

$$\begin{aligned}
\mathrm{rot}\vec{E}^{SI} &= -\frac{\partial\vec{B}^{SI}}{\partial t} && \text{Faradaysches Induktionsgesetz ,}\\
\mathrm{rot}\vec{B}^{SI} &= \frac{1}{\varepsilon_0 c^2}\vec{j}^{SI} + \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{E}^{SI}}{\partial t} && \text{Ampèrescher Durchflutungssatz ,}\\
\mathrm{div}\vec{E}^{SI} &= \frac{\varrho^{SI}}{\varepsilon_0} && \text{Gaußscher Satz für Elektrostatik und}\\
\mathrm{div}\vec{B}^{SI} &= 0 && \text{Gaußscher Satz für Magnetfelder}\\
\vec{F}^{SI} &= q^{SI}\left(\vec{E}^{SI} + \vec{v}^{SI}\times\vec{B}^{SI}\right) && \text{Lorentzkraft}\\
\text{mit } \varepsilon_0 &= 8,8\times 10^{-12}\frac{As}{Vm}\,. && (4.125)
\end{aligned}$$

In dieser Form haben die elektrische Feldstärke E und die magnetische Flussdichte B eine andere Dimension. Diese Form der Maxwellgleichungen bezieht sich auf Basisstandardeinheitensystem (SI). Das SI-System ist ein metrisches System, d.h. die Einheiten einer Größe werden in Zehnerpotenzen abgestuft. Jede Basiseinheit wurde für eine sogenannte Basisgröße festgelegt. Der Vorteil der Verwendung von kohärenten SI-Einheiten liegt darin, dass keine Umrechnungsfaktoren notwendig sind. Eine nicht kohärente Einheit ist Millimeter. Bei einer Berechnung mit einer Längenangabe in Millimeter muss ein Umrechnungsfaktor eingesetzt werden, damit das Ergebnis die richtige Dimension aufweist. Nun sind die Maxwellgleichungen in SI-Einheiten angeben, aber auf dem Gebiet der Theoretischen Physik oder der Teilchenphysik ist die Verwendung von SI-Einheiten nicht sinnvoll. Diese Gebiete beschäftigen sich mit sehr kleinen Objekten. Außerdem werden elektrische und magnetische Größen beim Übergang zwischen Inertialsystemen miteinander gemischt. Dabei ist es eben ungünstig, dass die elektrische Feldstärke E und die magnetische Flussdichte B eine andere Dimension haben. Mit der Verwendung der Heaviside-Lorentz-Einheiten wird diese Problematik behoben. Im Besonderen wird sichtbar, dass die Beträge der elektrischen Feldstärke und der magnetischen Feldstärke einer elektromagnetischen Welle durch die Wahl der Heaviside-Lorentz-Einheiten gleich groß sind. Ein schöner Nebeneffekt durch die Verwendung der Heaviside-Lorentz-Einheiten ist die sichtbar werdende Symmetrie der Maxwellgleichungen. Dabei treten für die Umwandlung zwischen SI-Einheiten und Heaviside-Lorentz-Einheiten folgende Umwandlungen auf [Neufeld 2006/07]

$$\begin{aligned} \vec{E}^{HL} &= \sqrt{\varepsilon_0}\vec{E}^{SI} \qquad \vec{B}^{HL} = c\sqrt{\varepsilon_0}\vec{B}^{SI} \\ \varrho^{HL} &= \frac{\varrho^{SI}}{\sqrt{\varepsilon_0}} \qquad \vec{j}^{HL} = \frac{\vec{j}^{SI}}{\sqrt{\varepsilon_0}}\,. \end{aligned} \tag{4.126}$$

Die Maxwellgleichungen haben nach der Umwandlung in Heaviside-Lorentz-Einheiten folgende Form

$$\begin{aligned} \mathrm{rot}\frac{\vec{E}^{HL}}{\sqrt{\varepsilon_0}} &= -\frac{\frac{\partial \vec{B}^{HL}}{c\sqrt{\varepsilon_0}}}{\partial t} \rightarrow rot\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\vec{B}}{\partial t} \\ \mathrm{rot}\vec{B}^{HL} &= \frac{\vec{j}^{HL}}{c} + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}^{HL}}{\partial t} \\ \mathrm{div}\vec{E}^{HL} &= \varrho^{HL} \qquad \mathrm{div}\vec{B}^{HL} = 0 \\ \vec{F}^{HL} &= q^{HL}\Big(\vec{E}^{HL} + \frac{\vec{v}^{HL}}{c} \times \vec{B}^{HL}\Big)\,. \end{aligned} \tag{4.127}$$

An diesen Gleichungen erkennt man die entstandene Symmetrie der Gleichungen. In der Folge werden alle Größen in Heaviside-Lorentz-Einheiten angegeben und auf Kürzel HL verzichtet. Einzig die Lichtgeschwindigkeit c verbleibt als klassische Konstante in der elektromagnetischen Theorie in Heaviside-Lorentz-Einheiten. Die Lorentzkraft $\vec{F}$ in Heaviside-Lorentz-Einheit zeigt auch deutlich, dass die Beiträge von elektrischer und magnetischer Komponente bei Lichtgeschwindigkeit gleich groß werden. Dies ist in SI-Einheiten nicht direkt aus der Gleichung ersichtlich. Anhand der ersten Gleichung soll gezeigt werden

$$\begin{aligned} \mathrm{rot}\vec{E} =& -\frac{1}{c}\frac{\vec{B}}{\partial t} \\ \frac{E}{X} =& \frac{B\cdot T}{X\cdot T} \\ & \left.\begin{array}{ll} X & \text{Ortsdimension} \\ T & \text{Zeitdimension} \end{array}\right\} \rightarrow E-\text{Dimension} = B-\text{Dimension}\,, \end{aligned} \tag{4.128}$$

dass die Dimensionen der elektrischen und magnetischen Komponente des elektromagnetischen Feldes in Heaviside-Lorentz-Einheiten gleich sind. In der nun folgenden Diskussion wird gezeigt, welchen Beitrag ein elektromagnetisches Feld mit der magnetischen Flussdichte $\vec{B}(t,\vec{x})$ sowie mit der elektrischen Feldstärke $\vec{E}(t,\vec{x})$ und geladene sich bewegende Punktteilchen mit der Masse $m^{(a)}$, der Ladung $q^{(a)}$, der Trajektorie $\vec{r}^{(a)}(t)$ in einem Gebietes V zur Gesamtenergie leisten. Dabei ergibt sich die Gesamtenergie aus [Neufeld 2006/07]

$$\varepsilon_V^{Feld} = \frac{1}{2}\int\limits_V d^3x\Big(\vec{E}^{\,2}+\vec{B}^{\,2}\Big)\,. \tag{4.129}$$

Um zu zeigen, dass die Gesamtenergie des Feldes im Gebiet V nur von den Betragsquadraten der elektrischen und magnetischen Komponente des Feldes abhängt, wird die zeitliche Änderung der Energie, also die Leistung betrachtet,

$$\frac{d}{dt}\varepsilon_V^{Feld} = \int\limits_V d^3x\Big(\vec{E}\frac{d\vec{E}}{dt}+\vec{B}\frac{d\vec{B}}{dt}\Big)\,. \tag{4.130}$$

Nun werden die zeitlichen Änderungen der elektrischen und magnetischen Komponenten im Integral durch die Maxwellgleichungen ausgedrückt:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\varepsilon_V^{Feld} &= \int\limits_V d^3x\Big(\vec{E}\cdot(c\,\mathrm{rot}\vec{B}-\vec{j})+\vec{B}\cdot(-c\,\mathrm{rot}\vec{E})\Big)\\ &= -\int\limits_V d^3x\vec{E}\cdot\vec{j}+c\int\limits_V d^3x\Big(\vec{E}\cdot\,\mathrm{rot}\vec{B}-\vec{B}\cdot\,\mathrm{rot}\vec{E}\Big)\,. \end{aligned} \tag{4.131}$$

Das erste Integral in der letzten Gleichung wird auf die linke Seite gebracht. Dadurch wird die Bedeutung der Integrale deutlich

$$\underbrace{\frac{d\varepsilon_V^{Feld}}{dt}}_{\text{Leistung des EM}-\text{Feldes}} + \underbrace{\int\limits_V d^3x\,\vec{E}\cdot\vec{j}}_{\text{Leistung an den Teilchen}} = \underbrace{c\int\limits_V d^3x\Big(\vec{E}\cdot\,\mathrm{rot}\vec{B}-\vec{B}\cdot\,\mathrm{rot}\vec{E}\Big)}_{\text{Randterm}}\,. \tag{4.132}$$

Der Randterm ist jener Anteil der Leistung, der aus dem Volumen V entweicht. Als nächstes wird gezeigt, dass das Integral auf der linken Seite tatsächlich der Leistung entspricht, die vom Feld an den Ladungen im Gebiet V verrichtet wird. Die Stromdichte $\vec{j}$ versteht man als bewegte Ladungen $q^{(a)}$ auf ihren Trajektorien $\vec{r}^{(a)}(t)$. Damit wird aber das kontinuierliche Integral durch die Teilchen in eine diskrete Summe über alle Teilchen im Gebiet V

$$\int\limits_V d^3x\,\vec{j}\cdot\vec{E} = \sum_{a\in V} q^{(a)}\frac{d\vec{r}^{(a)}(t)}{dt}\vec{E}(t,\vec{r}^{(a)}(t)) = \sum_{a\in V} q^{(a)}\vec{v}^{(a)}\vec{E}^{(a)} = \frac{d}{dt}\sum_{a\in V}\varepsilon^{(a)} \tag{4.133}$$

umgewandelt, worin $\varepsilon^{(a)}$ die Energie eines relativistischen Teilchens a im Gebiet V ist. Die zeitliche Änderung ist die Leistung, die durch das Feld an ein Teilchen a abgegeben wird. Es bleibt die Frage offen, warum nur die elektrische Komponente $\vec{E}$ auf die Teilchen wirkt. Vor Erklärung der Frage sei daran erinnert, dass auf bewegte Ladungen neben der Coulombkraft auch die Lorentzkraft wirkt. Betrachtet man die Gleichung

$$\frac{d\varepsilon^{(a)}}{dt} = \vec{v}^{(a)}\vec{F}_V^{(a)} = \vec{v}^{(a)}q^{(a)}\Big(\vec{E}^{(a)}+\underbrace{\frac{\vec{v}^{(a)}}{c}\times\vec{B}^{(a)}}_{\vec{v}\perp\vec{B}}\Big) \tag{4.134}$$

so versteht man, warum das magnetische Feld die kinetische Energie eines geladenen Teilchens nicht ändert. Die von der magnetischen Komponente des Feldes

verursachte Lorentzkraft steht senkrecht auf der Bewegungsrichtung der Teilchen und verrichtet somit keine Arbeit an den Teilchen. Somit ist auch die zeitliche Änderung also die Leistung der magnetischen Komponente am Teilchen Null. Es bleibt dann nur noch die Wirkung der elektrischen Komponente $\vec{E}$ des Feldes übrig, wie bereits vorher ohne Rücksicht auf die Lorentzkraft gezeigt wurde. Damit ist die zeitliche Änderung der Gesamtenergie

$$\frac{d}{dt}\left(\varepsilon_V^{Feld} + \sum_{a\in V} \varepsilon^{(a)}\right) = c \int_V d^3x \left(\vec{E} \cdot \mathrm{rot}\vec{B} - \vec{B} \cdot \mathrm{rot}\vec{E}\right) \tag{4.135}$$

aufgeteilt auf die Energie des Feldes ε_V^{Feld} und die Energie der Teilchen $\varepsilon^{(a)}$. Mit der Einführung eines Tensors ε_{ijk} und dessen Eigenschaften kann man den verbleibenden Integranden um schreiben. Der Tensor hat folgende Eigenschaften [Neufeld 2006/07, Ecker 2008/09]

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{falls i, j, k eine gerade Permutation von 1, 2, 3} \\ -1 & \text{falls i, j, k eine ungerade Permutation von 1, 2, 3} \\ 0 & \text{sonst, d.h. wenn mind. zwei Indizes übereinstimmen} \end{cases}$$

daraus folgt

$$\begin{aligned} &\varepsilon_{ijk} = -\varepsilon_{kji} \\ &\varepsilon_{iii} = \varepsilon_{iik} = \varepsilon_{ikk} = ... = 0\,. \end{aligned} \tag{4.136}$$

Bevor der Integrand in Tensorschreibweise notiert wird und einige Umformungen vorgenommen werden, wird das Kreuzprodukt des Nablaoperators und einer Komponente des elektromagnetischen Feldes in die Tensorschreibweise überführt:

Indexschreibweise des Kreuzproduktes

$$\vec{E} \cdot \mathrm{rot}\vec{B} = \vec{E} \cdot \left(\vec{\nabla} \times \vec{B}\right) = E_i \varepsilon_{i\,j\,k} \nabla_j B_k$$

Produktregel

$$\vec{\nabla}\left(\vec{E}\vec{B}\right) = \vec{E}\vec{\nabla}\vec{B} - \vec{B}\vec{\nabla}\vec{E}$$

Produktregel in Indexschreibweise

$$\varepsilon_{i\,j\,k} \nabla_j \left(E_i B_k\right) = E_i \varepsilon_{i\,j\,k} \nabla_j B_k - B_k \varepsilon_{k\,j\,i} \nabla_j E_i\,. \tag{4.137}$$

Unter Berücksichtigung dieser Regeln kann man folgende Umformungen des Integranden vornehmen:

$$c\int\limits_V d^3x\Big(\vec{E}\cdot\ \mathrm{rot}\vec{B}-\vec{B}\cdot\ \mathrm{rot}\vec{E}\Big)$$

Indexschreibweise der Kreuzprodukte

$$\vec{E}\cdot\ \mathrm{rot}\vec{B}-\vec{B}\cdot\ \mathrm{rot}\vec{E}=E_i\varepsilon_{i\,j\,k}\nabla_j B_k-B_k\varepsilon_{k\,j\,i}\nabla_j E_i$$

Produktregel in Indexschreibweise

$$E_i\varepsilon_{i\,j\,k}\nabla_j B_k-B_k\varepsilon_{k\,j\,i}\nabla_j E_i=\varepsilon_{i\,j\,k}\nabla_j\Big(E_iB_k\Big)=-\nabla_j\Big(\varepsilon_{j\,i\,k}E_iB_k\Big)$$

Vorzeichenregel des Tensors

$$\varepsilon_{i\,j\,k}\nabla_j\Big(E_iB_k\Big)=-\nabla_j\Big(\varepsilon_{j\,i\,k}E_iB_k\Big)\,. \tag{4.138}$$

Der Ausdruck $\varepsilon_{j\,i\,k}E_iB_k$ entspricht in Tensorschreibweise gerade wieder einem Kreuzprodukt von Vektoren. Hier ist es das Kreuzprodukt der Komponenten des elektromagnetischen Feldes $E_i\times B_k=\vec{E}\times\vec{B}$, so dass

$$-\nabla_j\Big(\varepsilon_{j\,i\,k}E_iB_k\Big)=-\mathrm{div}\Big(\vec{E}\times\vec{B}\Big) \tag{4.139}$$

ist. Unter Anwendung des Gaußschen Intergralsatzes kann man die Divergenz des Volumenintegrals in ein Integral über die Randfläche des Volumens

$$\frac{d}{dt}\left(\varepsilon_V^{Feld}+\sum_{a\in V}\varepsilon^{(a)}\right)=-\int\limits_{\partial V}d\vec{f}\,c\vec{E}\times\vec{B}=-\int\limits_{\partial V}d\vec{f}\,\vec{S} \tag{4.140}$$

umformen. Darin ist $\vec{S}$ die Energiestromdichte,

$$\vec{S}=c\vec{E}\times\vec{B}\,, \tag{4.141}$$

die auch als Poynting Vektor bezeichnet wird. Wie bei der Energie des Feldes gezeigt, wird im Folgenden der Impuls des Feldes bestimmt. Dabei wird davon ausgegangen, dass der Impuls des Feldes die Energie des Feldes pro Ausbreitungsgeschwindigkeit

$$\vec{P}=\frac{1}{c}\int\limits_V d^3x\Big(\vec{E}\times\vec{B}\Big)=\frac{1}{c^2}\int\limits_V d^3x\vec{S}$$

$$\dot{P}_i^{Feld}+\dot{P}_i^{\text{Teilchen in V}}=\int\limits_{\partial V}df_k\Big[\Big(B_iB_k+E_iE_k\Big)-\frac{1}{2}(\vec{E}^{\,2}+\vec{B}^{\,2})\delta_{ik}\Big] \tag{4.142}$$

ist. Hier handelt es sich um das elektromagnetische Feld und daher ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit für das Vakuum die Lichtgeschwindigkeit c (Anhang L).

4.11.3 Das freie elektromagnetische Feld aus ungekoppelten harmonischen Oszillatoren

Im kommenden Abschnitt soll gezeigt werden, wie sich das elektromagnetische Feld ohne Materie verhält. Das auffälligste Merkmal des materiefreien Feldes ist, das es keine Ladungen enthält. Dies spiegelt sich auch in den Maxwellgleichungen [Neufeld 2006/07]

$$\begin{aligned} \mathrm{rot}\vec{E} &= -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \qquad \mathrm{div}\vec{E} = 0 \\ \mathrm{rot}\vec{B} &= \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \qquad \mathrm{div}\vec{B} = 0 \\ \vec{F} &= q\Big(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}\Big) \end{aligned} \tag{4.143}$$

wieder. Am Beispiel des elektrischen Feldes soll gezeigt werden, wie dieses mit Hilfe der Maxwellgleichungen als Wellengleichung ausgedrückt werden kann. Zuerst wird die Operation rot auf die erste Gleichung angewendet. Dann wird die magnetische Komponente durch Substitution mit der zweiten Maxwellgleichung eliminiert. Abschließend erfolgen einige Umformungen und eine Substitution am Faradayschen Induktionssatz, woraus eine Wellengleichung für die elektrische Komponenten des materiefreien elektromagnetischen Feldes

$$\mathrm{rot}\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \Rightarrow \Delta\vec{E} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \tag{4.144}$$

hervorgeht (Anhang L). Auf analoge Weise kann man eine Wellengleichung für die magnetische Komponente des materiefreien elektromagnetischen Feldes aufstellen. Es ergeben sich die beiden Wellengleichungen

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - \Delta\vec{E} = 0 \,\mathrm{und}\, \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} - \Delta\vec{B} = 0 \tag{4.145}$$

für die elektrische und magnetische Komponente. Im Allgemeinen kann man für alle Komponenten des elektromagnetischen Feldes die folgenden eindimensionale Wellengleichung aufschreiben

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{f}}{\partial t^2} - \Delta\vec{f} = 0\,, \tag{4.146}$$

die sich jeweils nur auf eine Komponente bezieht. Für diese Wellengleichung soll die allgemeine Lösung gefunden werden, wobei der Funktion $f(t, \vec{x})$ die

folgenden periodischen Randbedingungen mit der Kantenlänge L eines Würfels

$$f(t, x + L, y, z) = f(t, x, y + L, z) = f(t, x, y, z + L) = f(t, x, y, z) \quad (4.147)$$

zugeschrieben werden, um die Betrachtungen an einem endlichen Volumen $V = L^3$ durchzuführen. Mit Hilfe eines vollständigen Orthonormalsystems (VONS) soll die Grundlage geschaffen werden, um die periodischen Funktionen $f(t, \vec{x})$ in Fourierreihen zerlegen zu können. Eine tragende Rolle spielen die folgenden Funktionen

$$\frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}} = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L}} \frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{L}} \frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{L}}, \qquad \vec{k} = \frac{2\pi}{L}\vec{l}, \qquad \vec{l} \in \mathbb{Z}^3, \qquad V = L^3\,, \quad (4.148)$$

die die Orthonormierungsrelation erfüllen, d.h. sie entsprechen einem Skalarprodukt

$$\int_V d^3x\, g(\vec{x})^* h(\vec{x}) = \int_V d^3x \frac{e^{-i\vec{k}'\vec{x}}}{\sqrt{V}} \frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}} = \delta_{\vec{k}'\vec{k}}\,. \quad (4.149)$$

Die Vollständigkeit des Orthonormalsystems erlaubt es, jede periodische Funktion in eine Fourierreihe mit den Koeffizienten $c_{\vec{k}}$

$$\begin{aligned} f(\vec{x}, t) =& \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}} c_{\vec{k}}(t) \\ c_{\vec{k}}(t) =& \int_V d^3x \frac{e^{-i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}} f(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (4.150)$$

zu entwickeln. Weiterhin wird gleich berücksichtigt, dass bei einer Zeitabhängigkeit der Funktion $f(\vec{x}, t)$ auch die Koeffizienten $c(\vec{k}, t)$ zeitabhängig sind. Um die Lösungen für die Koeffizienten $c(\vec{k}, t)$ zu finden, wird die Funktion $f(\vec{x}, t)$ in die Wellengleichung

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}} c_{\vec{k}}(t) =& \Delta \sum_{\vec{k}} \frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}} c_{\vec{k}}(t) \\ \frac{\partial^2}{\partial t^2} c_{\vec{k}}(t) =& -\vec{k}^{\,2} c^2 c_{\vec{k}}(t) \end{aligned} \quad (4.151)$$

eingesetzt (Anhang L). Im Grunde reicht es, diese ausführlich notierte Vektorrechnung für eine Komponente auszuführen und das Ergebnis dann in Vektorschreibweise zu übertragen.

Das Ergebnis entspricht der Schwingungsgleichung eines harmonischen Oszillators

$$\frac{\partial^2 c_{\vec{k}}(t)}{\partial t^2} = -c^2\vec{k}^2 c_{\vec{k}}(t) = -\omega^2 c_{\vec{k}}(t)$$
$$\omega = c|\vec{k}| \tag{4.152}$$

mit der Kreisfrequenz ω. Die allgemeine komplexe Lösung für die Fourierkoeffizienten $c_{\vec{k}}(t)$ der Differentialgleichung wird mit komplexen Exponentialfunktionen

$$c_{\vec{k}}(t) = a_{\vec{k}} e^{-i\omega_{\vec{k}} t} + b_{\vec{k}} e^{i\omega_{\vec{k}} t} \tag{4.153}$$

geschrieben. Das Notieren der Lösung in komplexen Exponentialfunktionen bringt Vorteile bei der weiteren Bearbeitung. Daraus folgt für die Funktion $f(t,x)$

$$f(t,\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{x}} \left(a_{\vec{k}} e^{-i\omega_{\vec{k}} t} + b_{\vec{k}} e^{i\omega_{\vec{k}} t} \right), \tag{4.154}$$

die die Wellengleichung erfüllt. Die Lösungen der Koeffizienten sollen in dem Fall der Beschreibung von Feldern reell sein. Damit ergibt sich noch eine weitere Vereinfachung $b_{\vec{k}} = a^*_{-\vec{k}}$

$$f(t,\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{x} - i\omega_{\vec{k}} t} + a^*_{-\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{x} + i\omega_{\vec{k}} t} \right). \tag{4.155}$$

Für das elektrische Feld $\vec{E}(\vec{x},t)$ einer einzigen Fourierkomponente ergibt sich

$$\vec{E}(\vec{x},t) = \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{V}} \left(e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega_{\vec{k}} t)} a + e^{-i(\vec{k}\vec{x} - \omega_{\vec{k}} t)} a^* \right) \vec{\varepsilon}. \tag{4.156}$$

In den folgenden Betrachtungen wird nur mit einer Fourierkomponente gearbeitet, bevor daraus ein Ergebnis für die Zusammensetzung aus verschiedenen Fourierkomponenten angegeben wird. Die gefundene Lösung ist analog zur Lösung der Wellengleichung $f(\vec{x},t)$ einer speziellen ebenen Welle mit einem bestimmten Wellenzahlvektor $\vec{k}$. Die verschiednen ebenen Wellen werden später superponiert. In (4.138) bedeuten

$$\begin{aligned} \mathcal{N} &= \text{Normierung}, \\ \vec{\varepsilon} &= \text{Polarisationsrichtung } \vec{E} \text{ als Einheitsvektor und} \\ \text{div}\vec{E} &= 0 \rightarrow \vec{k}\vec{\varepsilon} = 0\,. \end{aligned} \tag{4.157}$$

Die letzte Zeile sagt aus, dass durch Einsetzen der Gleichung für das elektrische Feld in die materiefreie und damit ladungsfreie Maxwellgleichung die Polarisationsrichtung senkrecht auf einem vorgegebenen Wellenzahlvektor steht. Damit gibt es nur zwei linear unabhängige Polarisationsmöglichkeiten. Alle anderen Polarisationsrichtungen können durch diese zwei linear unabhängigen Polarisationsrichtungen gebildet werden.
Die gefundene Lösung für das elektrische Feld muss die Maxwellgleichungen erfüllen. Daraus ergibt sich eine Eigenschaft für die Richtung von Wellenzahlvektor $\vec{k}$ und vom elektrischen Feld $\vec{E}$

$$\begin{aligned} 0 =& \operatorname{div} \vec{E}(t,\vec{x}) \\ 0 =& i\vec{k}\cdot\vec{E}(t,\vec{x})\,. \end{aligned} \tag{4.158}$$

Damit ist klar, dass die Ausbreitungsrichtung mittels Wellenzahlvektor und das elektrische Feld senkrecht zu einander stehen, d.h. als transversale Welle dargestellt werden kann. Wendet man nun die Gleichung für das elektrische Feld einer ebenen Welle mit einem bestimmten Wellenzahlvektor auf den Faradayschen Induktionssatz der Maxwellgleichungen an, dann erhält man eine Bestätigung für die Erwartung, dass das magnetische Feld, das elektrische Feld und der Wellenzahlvektor dieser ebenen elektromagnetischen Wellen ein Rechtssystem

$$0 = \operatorname{rot}\vec{E}(t,\vec{x}) + \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}(t,\vec{x})}{\partial t} \Rightarrow \vec{B}(t,\vec{x}) = \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}\times\vec{E}(t,\vec{x}) \tag{4.159}$$

bilden. Diese Aussage kann auf alle anderen ebenen Wellen des gleichen Feldes übertragen werden, schließlich unterscheiden sie sich nur im Betrag des Wellenzahlvektors nicht in der Richtung (Anhang L). Damit schwingen die Energiepakete transversal zur Ausbreitungsrichtung der Wellen. Im Falle einer ebenen Welle eines elektromagnetischen und materiefreien Feldes ergibt sich für die Energiedichte unter der Beachtung der Heaviside-Einheiten folgender Ausdruck

$$\text{Energiedichte} = u = \frac{1}{2}\left(\vec{E}^{\,2} + \vec{B}^{\,2}\right). \tag{4.160}$$

Die Ausbreitungsgeschwindigkeit ist im materiefreien Feld gerade die Lichtgeschwindigkeit. In diesem Fall sind magnetische und elektrische Komponente betragsgleich. Durch Einsetzen der gefundenen Beziehung zwischen magnetischem Feld, elektrischem Feld und Wellenzahlvektor erhält man für den Poyntingvek-

tor einer einzigen Fourierkomponente

$$\begin{aligned}
\vec{S} =& c\vec{E} \times \vec{B} = c\vec{E} \times \left(\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \times \vec{E} \right) = \frac{c}{|\vec{k}|} \varepsilon_{ijk} E_j \varepsilon_{klm} k_l E_m \\
=& \frac{c}{|\vec{k}|} \Big(\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl} \Big) E_j k_l E_m = \frac{c}{|\vec{k}|} \Big(\delta_{il}\delta_{jm} E_j k_l E_m - \delta_{im}\delta_{jl} E_j k_l E_m \Big) \\
=& \frac{c}{|\vec{k}|} \Big(E_m k_i E_m - E_j k_j E_i \Big) = \frac{c}{|\vec{k}|} \Big(k_i \vec{E}^{\,2} - \underbrace{\vec{k} \cdot \vec{E}}_{0} E_i \Big) = \frac{c\, k_i}{|\vec{k}|} \underbrace{\vec{E}^{\,2}}_{u} \\
\vec{S} =& cu \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \,.
\end{aligned} \tag{4.161}$$

Die Interpretation der letzten Gleichung führt zu dem Schluss, dass die Energiedichte u eines Feldes in Richtung der Ausbreitungsrichtung einer ebenen Welle mit einem bestimmten Wellenzahlvektor strömt, wobei die magnetische und elektrische Komponente des Feldes senkrecht zur Ausbreitungsrichtung schwingen.
Durch die Integration der Energiedichte über das Gebiet V erhält man die enthaltene Gesamtenerige des Feldes einer einzelnen Fourierkomponente oder auch Schwingungsmode (Anhang L)

$$\begin{aligned}
&\varepsilon = \int d^3u = \mathcal{N}^2 (aa^* + a^*a) \\
&\varepsilon = \int d^3u = \frac{\mathcal{N}^2}{V} (aa^* + a^*a) L_x L_y L_z = \mathcal{N}^2 (aa^* + a^*a) \\
&\text{mit } V = L^3 \text{ wobei } L_x = L_y = L_z \,,
\end{aligned} \tag{4.162}$$

darin wurde das Volumensintegral von (4.162) basierend auf das definierte Gebiet eines Würfels (4.147) ausgeführt. Aus der Impulsdichte kann man auf analoge Weise den im Gebiet V enthaltenen Impuls des Feldes bezogen auf eine einzelne Fourierkomponente

$$\vec{P} = \int d^3 \frac{\vec{S}}{c^2} = \frac{\mathcal{N}^2}{c} (aa^* + a^*a) \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} = \frac{\varepsilon}{c} \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \tag{4.163}$$

bestimmen.
Nun ist es so, dass ein Feld im allgemeinen nicht nur ebene Wellen mit einem Wellenzahlvektor enthalten, sondern eine Vielzahl verschiedener ebener Wellen mit unterschiedlichen Wellenzahlvektoren. Daher findet man die allgemeine

Lösung für verschiedene Fourierkomponenten durch Superposition aller ebenen Wellen

$$\vec{E} = \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{N_{\vec{k}}}{\sqrt{V}} \left(e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} a_{\vec{k},\lambda} + e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} a^*_{\vec{k},\lambda} \right) \vec{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda}$$

$$\vec{B} = \sum_{\vec{k},\lambda} \frac{N_{\vec{k}}}{\sqrt{V}} \left(e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} a_{\vec{k},\lambda} + e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} a^*_{\vec{k},\lambda} \right) \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \times \vec{\varepsilon}_{\vec{k},\lambda} \,, \tag{4.164}$$

die sich in ihren Wellenzahlvektoren unterscheiden. Dabei sind

$$\begin{aligned} &\lambda = \{1,2\} \text{Polarisationsrichtung der jeweiligen Welle} \\ &\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}; \vec{\varepsilon}_{\vec{k},1}; \vec{\varepsilon}_{\vec{k},2} = \text{Orthonormalbasis (ONB)} \,. \end{aligned} \tag{4.165}$$

Für die gesamte Energie des elektromagnetischen Feldes aus vielen ebenen Wellen mit unterschiedlichen Wellenzahlvektoren ergibt sich

$$\varepsilon = \sum_{\vec{k},\lambda} N^2_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k},\lambda} a^*_{\vec{k},\lambda} + a^*_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda} \right) . \tag{4.166}$$

Durch Superposition der Impulse von ebenen Wellen mit verschiedenen Wellenzahlvektoren ergibt sich

$$\vec{P} = \sum_{\vec{k},\lambda} N^2_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k},\lambda} a^*_{\vec{k},\lambda} + a^*_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda} \right) \frac{\vec{k}}{c|\vec{k}|} \tag{4.167}$$

der Gesamtimpuls des elektromagnetischen Feldes. Als Interpretation der Gleichungen (4.166) und (4.167) kann man sich das freie elektromagnetische Feld (EMF) durch unendlich viele ungekoppelte harmonische Oszillatoren vorstellen. Jedes $(\vec{k}, \lambda)$ hat einen Oszillator mit der Dispersionsrelation

$$\omega_{\vec{k}} = c|\vec{k}| \tag{4.168}$$

Die harmonischen Oszillatoren sind nicht miteinander gekoppelt, weil es in den beiden Gleichungen (4.166) und (4.167) keine Mischterme wie $a_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k}',\lambda'}$ mit $\vec{k}, \lambda \neq \vec{k}', \lambda'$ gibt. [Neufeld 2006/07]

4.11.4 Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

Die Quantisierung des freien elektromagnetischen Feldes wird genauso vorgenommen, wie beim harmonischen Oszillator. Die für das freie elektromagnetische Feld gefundenen Fourierkoeffizienten werden nun als Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren mit folgenden Eigenschaften [Neufeld 2006/07]

$$\begin{aligned} a^\dagger_{\vec{k}',\lambda'} &= \text{Erzeugungsoperator} \\ a_{\vec{k},\lambda} &= \text{Vernichtungsoperator} \\ &\text{mit } N^2_{\vec{k}} = \frac{\hbar\omega_{\vec{k}}}{2} \\ &\left[a_{\vec{k},\lambda} a^\dagger_{\vec{k}',\lambda'}\right] = \delta_{\vec{k},\vec{k}}\delta_{\lambda,\lambda} \\ &\left[a_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k}',\lambda'}\right] = 0 \end{aligned} \tag{4.169}$$

verstanden (Anhang L). Der Hamiltonoperator kann aus der Gesamtenergie des Systems

$$\sum_{\vec{k},\lambda} \frac{\hbar\omega_{\vec{k}}}{2}\left(a_{\vec{k},\lambda} a^\dagger_{\vec{k},\lambda} + a^\dagger_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda}\right) = \underbrace{\sum_{\vec{k},\lambda} \frac{\hbar\omega_{\vec{k}}}{2}}_{Vakuumsenergie} + \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar\omega_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda} \tag{4.170}$$

hergeleitet werden, wobei durch die Verschiebung des Energienullpunktes die Vakuumenergie eliminiert wird. Der Hamiltonoperator ergibt sich zu

$$H = \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar\omega_{\vec{k}} a^\dagger_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda}\,. \tag{4.171}$$

Analoge Gedanken werden zur Bestimmung des Impulses des freien elektromagnetischen Feldes

$$\vec{P} = \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar\vec{k} a^\dagger_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda} \tag{4.172}$$

durchgeführt [Neufeld 2006/07].

4.11.5 Teilcheninterpretion des elektromagnetischen Feldes

Die Interpretation des Abschnitts zur Quantisierung des freien elektromagnetischen Feldes zeigt durch die Festlegung des Nullpunktes, dass der Grundzustand $|0\rangle$ den Wert Null hat. Daraus ergeben sich für das freie elektromagnetische Feld

ohne Einwirkung von anderen Potentialen oder geladenen Teilchen die folgenden Grundzustandsbedingungen

$$\begin{aligned} |0\rangle =& \text{Grundzustand,} \\ H =& \sum_{\vec{k},\lambda} \hbar\omega_{\vec{k}} a^{\dagger}_{\vec{k},\lambda} a_{\vec{k},\lambda} \,,\; a_{\vec{k},\lambda}|0\rangle = 0 \;\Rightarrow\; H|0\rangle = 0 \,\text{und}\, \vec{P}|0\rangle = 0 \,, \end{aligned} \tag{4.173}$$

d.h. die Energie und der Impuls sind im Grundzustand Null. Die Anwendung des Erzeugungssoperators $a^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}$ auf den Grundzustand $|0\rangle$ ergibt nur Eigenzustände der Energie E und des Impulses $\vec{P}$ des freien elektromagnetischen Feldes. Damit lauten die Eigenwertgleichungen folgendermaßen

$$\begin{aligned} H\, a^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}|0\rangle =& \hbar\omega_{\vec{k}} a^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}|0\rangle \,, \\ \vec{P}\, a^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}|0\rangle =& \hbar\vec{k} a^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}|0\rangle \,. \end{aligned} \tag{4.174}$$

Daraus ergeben sich die folgenden Eigenwerte der Energie und des Impulses

$$\begin{aligned} E =& \hbar\omega_{\vec{k}} = \hbar c|\vec{k}| \,, \\ \vec{p} =& \hbar\vec{k} \end{aligned} \tag{4.175}$$

für den noch zu definierenden Energieträger des freien elektromagnetischen Feldes. Damit gibt es einen Zusammenhang zwischen Energie und Impuls, der als Energie-Impulsbeziehung masseloser Teilchen bekannt ist. Das bedeutet, die Anregung des quantifizierten freien elektromaganetischen Feldes beruht auf masselosen Photonen. Der Grundzustand des freien elektromagnetischen Feldes entspricht dem Vakuumszustand

$$a^{\dagger}_{\vec{k},\lambda}|0\rangle \,, \tag{4.176}$$

d.h. es gibt keine Photonen im Feld. Für die Situation das ein Photon im Feld ist, lautet der Zustandsvektor des freien elektromagnetischen Feldes. Dieses Photon hat folglich den Impuls $\hbar\vec{k}$ und die Polarisation λ

$$\begin{aligned} & a^{\dagger}_{\vec{k}_1,\lambda_1} a^{\dagger}_{\vec{k}_2,\lambda_2}|0\rangle \\ & \text{mit}\, \vec{k}_1, \lambda_1 \neq \vec{k}_2, \lambda_2 \,. \end{aligned} \tag{4.177}$$

Der Zustandsvektor für die Beschreibung des freien elektromagnetischen Feldes mit zwei Photonen, die unterschiedliche Implulse und Polarisationen haben, lautet dann durch zweifache Anwendung des Erzeugungsoperators auf den

Grundzustand. Daraus leiten sich die Eigenwertprobleme für zwei Teilchen

$$\begin{aligned} H\, a^\dagger_{\vec{k}_1,\lambda_1}\, a^\dagger_{\vec{k}_2,\lambda_2}|0\rangle =& \left(\hbar\omega_{\vec{k}_1} + \hbar\omega_{\vec{k}_2}\right) a^\dagger_{\vec{k},\lambda}|0\rangle \\ \vec{P}\, a^\dagger_{\vec{k}_1,\lambda_1}\, a^\dagger_{\vec{k}_2,\lambda_2}|0\rangle =& \left(\hbar\vec{k}_1 + \hbar\vec{k}_2\right) a^\dagger_{\vec{k}_2,\lambda_2}|0\rangle \\ & \text{mit Photon 1}: H_1 = \hbar\omega_{\vec{k}_1} \\ & \qquad\qquad \vec{p}_1 = \hbar\vec{k}_1 \\ & \text{mit Photon 2}: H_2 = \hbar\omega_{\vec{k}_2} \\ & \qquad\qquad \vec{p}_2 = \hbar\vec{k}_2 \end{aligned} \tag{4.178}$$

her. Die Photonenverteilung in den einzelnen Zuständen des freien elektromagnetischen Feldes folgt der Einstein-Bose-Verteilung. Photonen sind also Bosonen, d.h. es gibt keine Einschränkung für Photonen gleichen Einteilchenzustandes. Das bedeutet beliebig viele Photonen können den gleichen Einteilchenzustand einnehmen. Hier sei daran erinnert, dass dies für Fermionen, wie es Elektronen sind, nicht geht, weil Fermionen dem Pauli-Prinzip unterliegen. Im Allgemeinen lautet dann die Energie-Impuls-Eigenzustandsbeziehung für Photonen verschiedener Impulse und Polarisationen wie folgt

$$|n_{\vec{k}_1,\lambda_1}, n_{\vec{k}_2,\lambda_2}...\rangle = \frac{\left(a^\dagger_{\vec{k}_1,\lambda_1}\right)^{n_{\vec{k}_1,\lambda_1}}}{\sqrt{n_{\vec{k}_1,\lambda_1}!}} \frac{\left(a^\dagger_{\vec{k}_2,\lambda_2}\right)^{n_{\vec{k}_2,\lambda_2}}}{\sqrt{n_{\vec{k}_2,\lambda_2}!}} ...|0\rangle \tag{4.179}$$

darin ist $n_{\vec{k}_1,\lambda_1}$ die Anzahl der Photonen mit gleichem Impuls $\vec{k}_1$ und gleicher Polarisation λ_1 sowie $n_{\vec{k}_2,\lambda_2}$ die Anzahl von Photonen mit einem anderen gleichen Impuls $\vec{k}_2$ und einer anderen gleichen Polarisation λ_2 und so fort. [Neufeld 2006/07]

4.11.6 Reflexion und Brechung an einer Glasscheibe

Die folgenden Ausführungen sollen zum Verständnis der Ausführungen Feynmans in seinem Buch *QED - A Strange Theory of Light and Matter* dienen [Feynman 2006]. Es wird gezeigt werden, wie Feynman auf die Werte für die Transmission und Reflexion eines monochromatischen Photons an einer dünnen Kronglasschicht im Abschnitt *Photons - Particles of Light* kommt, wenn die Photonen im rechten Winkel auf die Grenzschicht treffen.
An einer Grenzschicht von Vakuum und Kronglas mit einem mittleren Brechungsindex $n_G = 1,5$ kann ein Photon entweder reflektiert oder transmittiert werden. Unter Verwendung des Poyntingvektors (4.161) für die einlaufende Welle $\langle\vec{S}\rangle$, die reflektierte Welle $\langle\vec{S_R}\rangle$ und die transmittierte Welle $\langle\vec{S_T}\rangle$

[Ecker 2008/09] kann man (abgesehen von eventuellen auftretenden komplexen Phasenfaktoren) auf die folgenden Amplituden für die Reflexion r und die Transmission t an der Grenzschicht von Vakuum zu Kronglas schließen

$$r = \frac{n_V - n_G}{n_G + n_V}, \qquad t = \frac{2\sqrt{n_G n_V}}{n_G + n_V}\,. \tag{4.180}$$

Es ergeben sich die gleichen Werte für die Amplituden wie im Abschnitt *Photons - Particles of Light* auf Seite 64 [Feynman 2010]

$$r = \frac{1 - 1,5}{1,5 + 1} = -0,2\,, \qquad t = \frac{2\sqrt{1,5 \cdot 1}}{1,5 + 1} \approx 0,98\,. \tag{4.181}$$

Die Absolutquadrate der Amplituden den Wert eins für die Wechselwirkung eines Photons mit einer Grenzschicht ergeben

$$\begin{aligned} 1 =& |r|^2 + |t|^2 = \frac{(n_G - n_V)^2 + 4 n_G n_V}{(n_G + n_V)^2} = \frac{n_G^2 - 2 n_G n_V + n_V^2 + 4 n_G n_V}{(n_G + n_V)^2} \\ =& \frac{n_G^2 + 2 n_G n_V + n_V^2}{(n_G + n_V)^2} = \frac{(n_G + n_V)^2}{(n_G + n_V)^2} = 1\,. \end{aligned} \tag{4.182}$$

Nun soll gezeigt werden, wie sich die Amplitude für die Transmission an einer Schicht mit der Dicke d und aus Kronglas mit dem Brechungsindex $n_G = 1,5$ aus verschiedenen Teilamplituden zusammensetzt. Dazu wird als erstes die Amplitude für die Transmission ohne Reflexion im Glas

$$T_1 = t^2 e^{ik_G d} \tag{4.183}$$

berechnet. Das Photon wird auf dem Weg an der Grenzschicht von Vakuum zum Kronglas transmittiert, dann passiert das Photon das Glas mit der Ausbreitungsamplitude $K_P = e^{ik_G d}$, bevor dann die Transmission vom Kronglas zum Vakuum erfolgt und das Photon im Detektor D_T ankommt. Nun wird die Amplitude für die Transmission mit zwei Reflexionen im Glas berechnet (Abb. 4.7)

$$T_2 = t^2 e^{3ik_G d}(-r)^2 = t^2 e^{ik_G d} e^{2ik_G d}(-r)^2 = T_1 e^{2ik_G d}(-r)^2\,. \tag{4.184}$$

Eine weitere Amplitude für die Transmission mit vier Reflexionen im Glas soll helfen, die Gesamtamplitude herzuleiten:

$$T_3 = t^2 e^{5ik_G d}(-r)^4 = t^2 e^{ik_G d} e^{4ik_G d}(-r)^4 = T_1 e^{4ik_G d}(-r)^4\,. \tag{4.185}$$

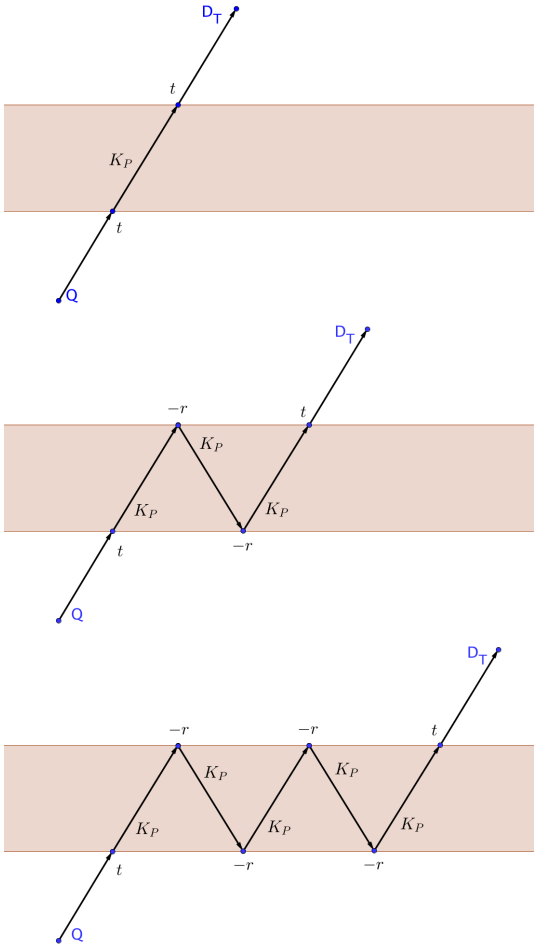


Abbildung 4.7: Transmissionsamplituden für den Druchgang durch eine dünne lichtdurchlässige Schicht, wobei zur Veranschaulichung das Licht nicht orthogonal auf die Fläche trifft, von oben beginnend mit T_1 bis T_3 mit dem Ausbreitungskern $K_P = e_{ik_g d}$ für das Passieren der Glasschicht

Damit ergibt sich die Gesamtamplitude aus der Summe der Amplituden der einzelnen Pfade zu

$$\begin{aligned} T =& T_1 + T_2 + T_3 + ... \\ =& t^2 e^{ik_G d} + t^2 e^{ik_G d}\left[e^{2ik_G d}(-r)^2\right] + t^2 e^{ik_G d}\left[e^{4ik_G d}(-r)^4\right] + ... \\ =& t^2 e^{ik_G d}\left[1 + e^{2ik_G d}(-r)^2 + e^{4ik_G d}(-r)^4 + ...\right] \\ =& t^2 e^{ik_G d}\left[1 + e^{2ik_G d} r^2 + e^{4ik_G d} r^4 + ...\right]. \end{aligned} \tag{4.186}$$

Mit Hilfe der geometrischen Reihe $1+q+q^2+... = \frac{1}{1-q}$ wird die Gesamtamplitude wie folgt geschrieben

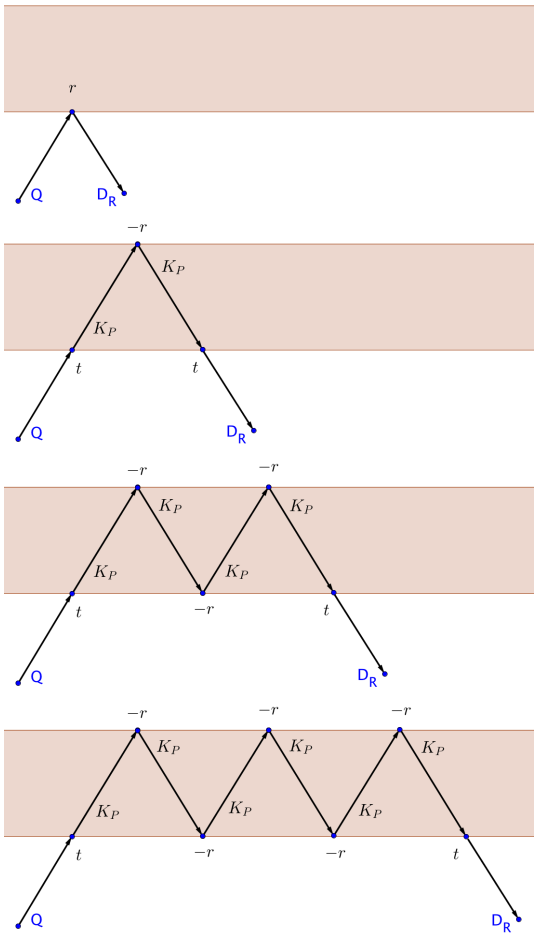


Abbildung 4.8: Reflexionsamplituden an einer dünnen lichtdurchlässigen Schicht, wobei zur Veranschaulichung das Licht nicht orthogonal auf die Fläche trifft, von oben beginnend mit R_1 bis R_4 mit dem Ausbreitungskern K_P für das Passieren der Glasschicht

$$T = \frac{t^2 e^{ik_G d}}{1 - r^2 e^{2ik_G d}} \,. \tag{4.187}$$

Ähnlich kann man nun mit der Reflexion eines Photons zum Detektor an D_R verfahren. Zuerst wird die bereits bekannte Amplitude für eine Reflexion beim

Übergang von Vakuum in das Kronglas benötigt

$$R_1 = r = \frac{n_V - n_G}{n_V + n_G}\,. \tag{4.188}$$

Als zweite Amplitude der Reflexion eines Photons wird die Grenzschicht von Kronglas zum Vakuum betrachtet. Entlang dieses Weges tritt das Licht an einer Stelle in das Kronglas, dort muss die Transmissionamplitude t verwendet werden. Dann passiert das Photon wieder das Kronglas mit der Amplitude K_P. An der nächsten Grenzschicht wird das Licht von Kronglas nach Vakuum reflektiert, was der negativen Amplitude der Reflexion von Vakuum nach Kronglas $-r$ entspricht. Dann folgt eine Passage des Photons durch das Kronglass mit der Ausbreitungsamplitude K_P und abschließend eine Transmission, bevor das Photon den Detektor am Ort D_R erreicht und es ergibt sich

$$R_2 = t^2 \cdot e^{2ik_G d}(-r) = -t^2 r \cdot e^{2ik_G d}\,. \tag{4.189}$$

Im folgenden werden noch zwei weitere Amplituden für mehrfach Reflexionen im Glas berechnet

$$\begin{aligned} R_3 &= t^2 \cdot e^{4ik_G d}(-r)^3 = -t^2 r^3 \cdot e^{4ik_G d} \\ R_4 &= t^2 \cdot e^{6ik_G d}(-r)^5 = -t^2 r^5 \cdot e^{6ik_G d}\,. \end{aligned} \tag{4.190}$$

Nun kann man alle alternative Wege (Abb. 4.8), die das Photon zum Detektor an Punkt D_R nimmt, addieren und eine Formel für die Reflexion von Photonen an einer Glasschicht mit der Dicke d berechnen

$$\begin{aligned} R =& R_1 + R_2 + R_3 + R_4 + ... \\ =& r - t^2 \cdot e^{2ik_G d} \cdot r - t^2 \cdot e^{4ik_G d} \cdot r^3 - t^2 \cdot e^{6ik_G d} \cdot r^5 + ... \\ =& r - \Big(t^2 \cdot e^{2ik_G d} \cdot r \underbrace{[1 + e^{2ik_G d} \cdot r^2 + e^{4ik_G d} \cdot r^4] + ...}_{\frac{1}{1-r^2 e^{2ik_G d}}}\Big) \\ R =& r - \frac{t^2 \cdot e^{2ik_G d} \cdot r}{1 - r^2 e^{2ik_G d}}\,. \end{aligned} \tag{4.191}$$

In Abb. (4.9) sieht man, dass sich aus den berechneten Betragsquadraten für die Reflexion $|R|^2$ und Transmission $|T^2|$ die gleichen Funktionsgraphen wie in Feynmans *QED - A Strange Theory of Light and Matter* auf Seite 34 ergeben [Feynman 2006]. Allerdings wurden auch das Betragsquadrat der Transmission und die Summe der Betragsquadrate dargestellt. Im Folgenden werden die Absolutquadrate der Amplituden $|R|^2$ und $|T|^2$ für ein monochromatisches Photon

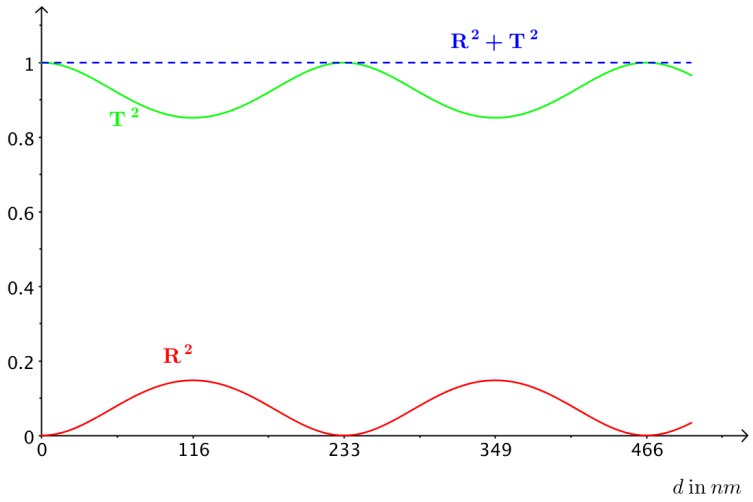


Abbildung 4.9: Darstellung der Wahrscheinlichkeiten für die Reflexion R^2, Transmission T^2 und die Summe $R^2 + T^2$ für rotes Licht mit einer Wellenlänge von 464nm (Anhang M) in Abhängigkeit von der Dicke d in nm der Kronglasschicht mit einem Brechungsindex von 1,5

an einer Kronglasschicht mit der Dicke d berechnet und dann die Summe der Absolutquadrate gegen den Wert eins getestet. Als erstes soll das Absolutquadrat der Transmission berechnet werden

$$\begin{aligned} |T|^2 &= \left| \frac{t^2 e^{ik_G d}}{1 - r^2 e^{2ik_G d}} \frac{t^2 e^{-ik_G d}}{1 - r^2 e^{-2ik_G d}} \right| \\ &= \left| \frac{t^4}{1 - r^2 e^{2ik_G d} - r^2 e^{-2ik_G d} + r^4} \right| \\ &\quad \text{mit } 1 = t^2 + r^2 \\ &= \left| \frac{1 + r^4 - 2r^2}{1 - r^2 e^{2ik_G d} - r^2 e^{-2ik_G d} + r^4} \right| . \end{aligned} \tag{4.192}$$

Nun wird das Absolutquadrat der Reflexion berechnet

$$\begin{aligned} |R|^2 &= \left| \left(r - \frac{t^2 r e^{2ik_G d}}{1 - r^2 e^{2ik_G d}} \right) \left(r - \frac{t^2 r e^{-2ik_G d}}{1 - r^2 e^{-2ik_G d}} \right) \right| \\ &= \left| \left(\frac{r - r^3 e^{2ik_G d} - t^2 r e^{2ik_G d}}{1 - r^2 e^{2ik_G d}} \right) \left(\frac{r - r^3 e^{-2ik_G d} - t^2 r e^{-2ik_G d}}{1 - r^2 e^{-2ik_G d}} \right) \right| \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \left| \frac{r^2\Big(1-(r^2+t^2)e^{2ik_G d}\Big)\Big(1-(r^2+t^2)e^{-2ik_G d}\Big)}{1-r^2e^{2ik_G d}-r^2e^{-2ik_G d}+r^4} \right| \\
&\quad \text{mit } 1 = t^2 + r^2 \\
&= \left| \frac{r^2\Big(1-e^{2ik_G d}\Big)\Big(1-e^{-2ik_G d}\Big)}{1-r^2e^{2ik_G d}-r^2e^{-2ik_G d}+r^4} \right| \\
&= \left| \frac{r^2\Big(1-e^{2ik_G d}-e^{-2ik_G d}+1\Big)}{1-r^2e^{2ik_G d}-r^2e^{-2ik_G d}+r^4} \right| .
\end{aligned} \tag{4.193}
$$

Damit lautet die Summe der beiden Absolutquadrate

$$
\begin{aligned}
1 &= |R|^2 + |T|^2 \\
1 &= \left| \frac{r^2\Big(1-e^{2ik_G d}-e^{-2ik_G d}+1\Big)+1+r^4-2r^2}{1-r^2e^{2ik_G d}-r^2e^{-2ik_G d}+r^4} \right| \\
1 &= \left| \frac{1-r^2e^{2ik_G d}-r^2e^{-2ik_G d}+r^4}{1-r^2e^{2ik_G d}-r^2e^{-2ik_G d}+r^4} \right| ,
\end{aligned} \tag{4.194}
$$

dabei ergibt sich die erwartete Gesamtwahrscheinlichkeit von eins wie auch in Abb. (4.9) bereits gezeigt.
Es zeigt sich wieder wie schon den anderen Beispielen der Quantentheorie, dass die Betrachtungsweise nach Feynman nicht nur eine äquivalente Darstellung zur konventionellen Betrachtungsweise ist, sondern viel anschaulichere Amplituden und Wahrscheinlichkeiten ergibt.

5 Bewertung von Material für die Vermittlung von Quantentheorie

5.1 Animationen für den Einsatz im Unterricht und in Vorlesungen

Wie bereits in Kapitel (1) angedeutet, gibt es eine Vielzahl von Lehrbüchern, die das Thema Quantentheorie auf verschiedene Art und Weise behandeln. Im Zuge der Umsetzung der standardisierten kompetenzorientierten Reifeprüfung und auf Grundlage verschiedener Erhebungen wird es auch erforderlich sein, die traditionellen Konzepte der Vermittlung im Unterrichtsgegenstand Physik zu überdenken [Hopf 2012]. So mahnt Apolin zu recht an, dass es nicht reicht nur eine kompetenzorientierte Reifeprüfung einzuführen, sondern dass es dringends notwendig ist, diesen Paradigmenwechsel auch im Unterricht umzusetzen.[3]
Nach dem Kompetenzmodell für den Physikunterricht unterscheidet man Kompetenzen in drei Anforderungsniveaus, drei Handlungsdimensionen und Inhalte des Physiklehrplans. Zu den Handlungsdimensionen zählt man Wissen organisieren, Erkenntnisse gewinnen und Schlüsse ziehen. Während sich die Anforderungsniveaus in reproduzierendes Handeln, kombiniertes reproduzierendes und selbstständiges Handeln sowie weitgehend selbstständiges Handeln unterteilt. Bei beiden Kompetenzbereichen erkennt man, dass der Schwierigkeitsgrad mit dem Niveau zunimmt. Das bedeutet aber keinesfalls, dass man den anspruchsvollen Grad wie das Schlüsse ziehen nicht auch unmittelbar anstreben kann. So ist es leicht vorstellbar, dass Schüler unter Anleitung Schlüsse aus einem einfachen Experiment ziehen können, das nicht zu abstrakt ist. Es bedarf also eines Umdenkens von Wissensvermittlung nach dem „Nürnberger Trichter"-Modell hin zu aktiver Teilnahme der Schüler an der Wissensvermittlung. Eine zentrale Rolle können neben Lehrbüchern und Schülerversuchen Animationen sein, die sich im Besonderen für die Vermittlung der Quantentheorie eignen. Ein Grund liegt darin, dass es nicht immer möglich sein wird, quantentheoretische Expe-

[3] Apolin: „Eines muss man ganz klar festhalten: man kann nicht erwarten, dass die SchülerInnen eine kompetenzorientierte Matura hinlegen, wenn sie nicht im Vorfeld kompetenzorientiert unterrichtet wurden!" aus einer Präsentation auf der DirektorInnenklausur in Altlengbach, 28.11.2011

rimente in Schulen durchzuführen. Im Folgenden werden einige Animationen näher vorgestellt, wobei besonderer Wert auf die Rolle von Modelldarstellungen zur Veranschaulichung der quantentheoretischen Phänomene gelegt werden soll. Dieser Umstand hängt mit einer Umfrage am Ende des Schuljahres 2011/12 unter Schülern einer 7. Klasse eines Gymnasiums zusammen. Vor der Befragung wurden die Schüler über die Bedeutung der Anworten für diese Diplomarbeit hingewiesen. Die Schüler waren im Verlaufe des zweiten Schulhalbjahres bereits in einige Beispiele der Quantentheorie eingeführt worden. Dabei wurden die Schüler unter anderem gefragt, welches Modell sie für die Beschreibung der Quantentheorie verwenden würden. Zwei von elf Schülern haben als Antwort das Orbitalmodell genannt, während sechs Schüler gar keine Antwort gegeben haben. Allerdings gab es auch Antworten wie Photosynthese, Unschärferelation und Laser. In einer Frage zum Wesen des Lichts gaben vier Schüler als Antwort, dass Licht in Wellen und Teilchen ausgesendet wird. Zwei Schüler antworteten Licht bestehe aus Photonen und einer sieht Licht als Welle. Die restlichen Schüler haben Begriffe wie Strahlung, elektrischer Strom oder Protonen verwendet, wobei letzteres vielleicht ein Schreibfehler war, schließlich unterscheiden sich Photon und Proton nur in einem Buchstaben. Wenngleich nur zwei Schüler eine Idee zu Modellen für die Quantentheorie hatten, so haben andere Schüler gezeigt, dass noch weitere Modelle zur Beschreibung der Physik wie auch der Quantentheorie bekannt sind, aber nicht als Modell manifestiert sind. Nun kann man keine allgemeinen Schlüsse aus dieser kleinen nicht repräsentativen Umfrage ziehen. Allerdings stellen die abstrakten Konzepte der Quantentheorie ein Problem dar, das durch die Zuhilfenahme von Modellen und Animationen verkleinert werden kann. Eine umfangreiche Darstellung zu ausgewählten interaktiven Animationen, die teils im Internet benutzt werden können, findet man in der Diplomarbeit „Quantenphysik im Schulunterricht“ von Walter Doubek [Doubek 2004]. Unter anderem werden Animationen zu Absorbtions- und Emissionsspektren, Franck-Hertz Versuch, Tunneleffekt, Doppelspaltversuch und andere vorgestellt. Dabei wurden auch verschiedene Schwierigkeiten für den Einsatz von Computern im Unterricht beschrieben. So besteht eine Schwierigkeit in den selbst entwickelten Arbeitsblättern und den Aufzeichungen der Schüler während ihrer Arbeit am Computer [Doubek 2004]. Eine Alternative kann hier ein Moodlekurs darstellen. Dokumente können den Schülern online zur Verfügung gestellt werden und am Ende der Einheit in korrigerter Druckversion zur Verfügung gestellt werden. Der Vorteil dieser Variante ist die flexible Gestaltung der Arbeitsaufgaben, die eine individuelle Betreuung der Schüler erlaubt. Ziel dieses Kapitels ist es, eine Bewertung von verschiedenen Animationen unter dem Gesichtspunkt des Modellbegriffs vorzunehmen. Es werden Beschreibung,

Modell und Interaktion als Kriterien für die Beurteilung festgelegt.

Doppelspalt [Harrison 2002]

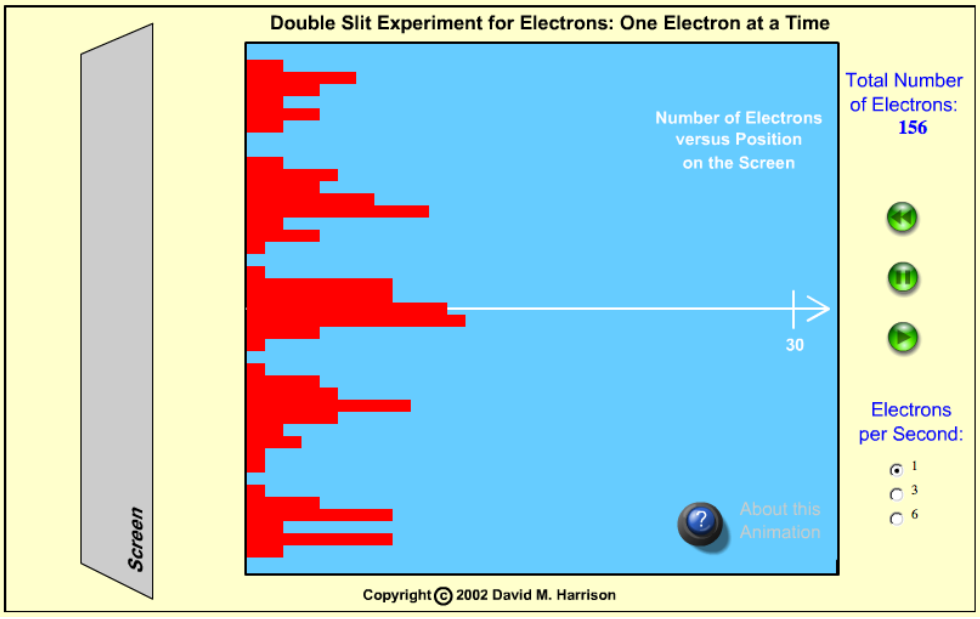


Abbildung 5.1: Histogramm der Animation zum Doppelspalt mit Elektronen [Harrison 2002]

Das Doppelspaltexperiment wird in Englisch mit kürzeren Texten und Bildern beschrieben. Sprachlich entsprechen die Texte dem Niveau B2 des Europäischen Referenzrahmen für Fremdsprachen. Es wird erklärt, wie eine Elektronenkanone funktioniert. Weiterhin wird das unerwartete Messergebnis des Doppelspaltversuchs mit Bildern dargestellt und beschrieben. Im Text gibt es einige Applikationen, die aber nicht interaktiv sind und nur das Beschreiben von Beobachtungen und das Ziehen von Schlüssen entwickeln können. Auf Grund der Textmenge im Vergleich zu den Animationen und Bildern, wird sich diese Webseite besser zur Festigung als zur Einführung eignen, was nicht unbedingt dem Fremdsprachenkonzept Content and Language Integrated Learning (CLIL) [Dalton-Puffer 2007] entspricht.
Es werden folgende Animationen gezeigt

- Doppelspaltanimation mit Histogramm und Screen (Abb. 5.1)

- Beobachtung des Durchgangs der Elektronen mit Licht ohne Histogramm
- Doppelspalt mit Vergleich von Teilchen und Welle

Keine der Animationen erlaubt dem Schüler eine Einstellmöglichkeit zur Untersuchung der Auswirkung verschiedener Parameter. Außerdem wird nicht beschrieben, wie sich die Elektronen verhalten. Zum Beispiel wird nur das Messergebnis des Doppelspalts durch die Animation nach gestellt, aber nicht aufgezeigt, wie diese Beobachtung mit einem Modell wie dem Zeiger beschrieben werden kann. Immerhin kann man mittels des Schirmes erkennen, dass immer nur ein Ereignis pro Zeiteinheit eintritt, wenn man pro Zeiteinheit nur ein Elektron aussendet. Mit Hilfe dieser Animation kann der Schüler lernen, welches sonderbare Verhalten Elektronen zeigen. Daher ist es auch nicht notwendig, die Spaltbreite und andere Paramter des Doppelspaltversuches zu verändern.

Feynman-Diagramme [MindBluff 2003]

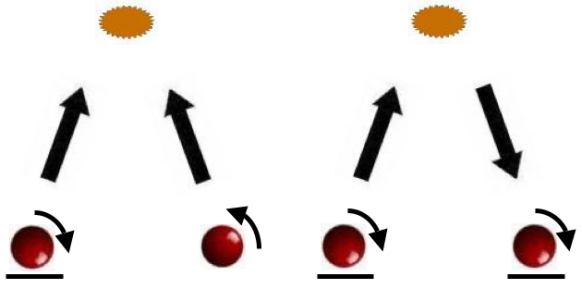


Abbildung 5.2: Feynman Diagramme links für die Paarvernichtung von Teilchen und Anti-Teilchen unter Emission eines Photons und rechts die Richtungsänderung mit Zeitumkehr unter Emission eines Photons [MindBluff 2003]

Im Grunde geht es nur um die interpretierte Zeitumkehr bei Teilchenbewegungen und um die Paarvernichtung sowie die Richtungsänderung eines Teilchens (Abb. 5.2). Die Texte sind in verständlichem Englisch und nicht zu lang. Die Animationen selber sind nur zum Beobachten und nicht interaktiv gestaltet. Die Animation eignet sich eher zur Festigung oder Kontrolle von Wissen zur Quantentheorie.

Eine Quantenwelt ohne Dualismus [Bader 1996]
Es handelt sich um ein Konzept für den Unterricht mit verschiedenen interaktiven Animationen, die allerdings nur auf PC funktionieren. Die Animationen sind knapp beschrieben und erlauben verschiedenste Einstellungen. Als physikalische Grundlage dient Feynmans Idee des Zeigerformalismus wie in *QED - the strange theory of light and matter* verwendet [Feynman 2006]. Im Grunde werden die Animationen in zwei Gruppen aufgeteilt, in Optik mit Experimenten wie Doppelspalt, Brechung, Reflexion und in Quanten mit Experimenten wie krumme Wege, Franck-Hertz Versuch. Die Oberfläche der Animationen ist nicht mehr ganz zeitgemäß und kann zu negativen Kommentaren durch die Schüler führen. Die Sammlung der interaktiven Animationen ist sehr umfangreich, so dass man eine geschickte Auswahl von Animationen nutzen sollte, um die Wesenszüge der Quantentheorie nach Feynman einzuführen und zu festigen. Dabei kann man auch andere Kompentenzen entwickeln als nur die rein inhaltliche Dimension. Für das Einführen in die Grundlagen des Zeigermodells werden folgende Animationen vorgeschlagen

- Zeigeraddition - erlaubt den Vergleich von Zeigermodell und Sinuswellenmodell
- Beugung am Spalt - Festigung und Interpretation des Zeigermodells
- Reflexion - erlaubt auch das Zerstückeln der reflektierenden Fläche (Abb. 5.3)
- Brechung - Festigung der Additions- und Multiplikationsregeln der Wahrscheinlichkeitsrechnung
- krumme Wege - Sensibilisierung für alle möglichen Wege, d.h. auch eine Wellenlinie oder ein Zick-Zack sind zwischen Quelle und Detektor erlaubt.

Anhand der Abbildung (5.3) kann man das Potential dieser Programme nur erahnen, denn es wird nur das Beispiel der Reflexion gezeigt. Die Benutzer haben die Möglichkeit jeden einzelnen Schritt durchzuklicken. Des Weiteren können Parameter wie Position der Quelle und des Detektors, der Wellenlänge sowie der Oberfläche vorgenommen werden. Diese Vielfalt erlaubt die Entwicklung jedes der drei Kompetenzbereiche - Anforderungsniveau, Lehrplaninhalt und Handlungsdimension [Apolin 2011]. So kann man auch einfach die Screenshots der Programme nuzten, um sie durch Schüler interpretieren zu lassen. Dazu wird ein Arbeitsblatt mit den Bildern und konkreten Aufgaben erforderlich

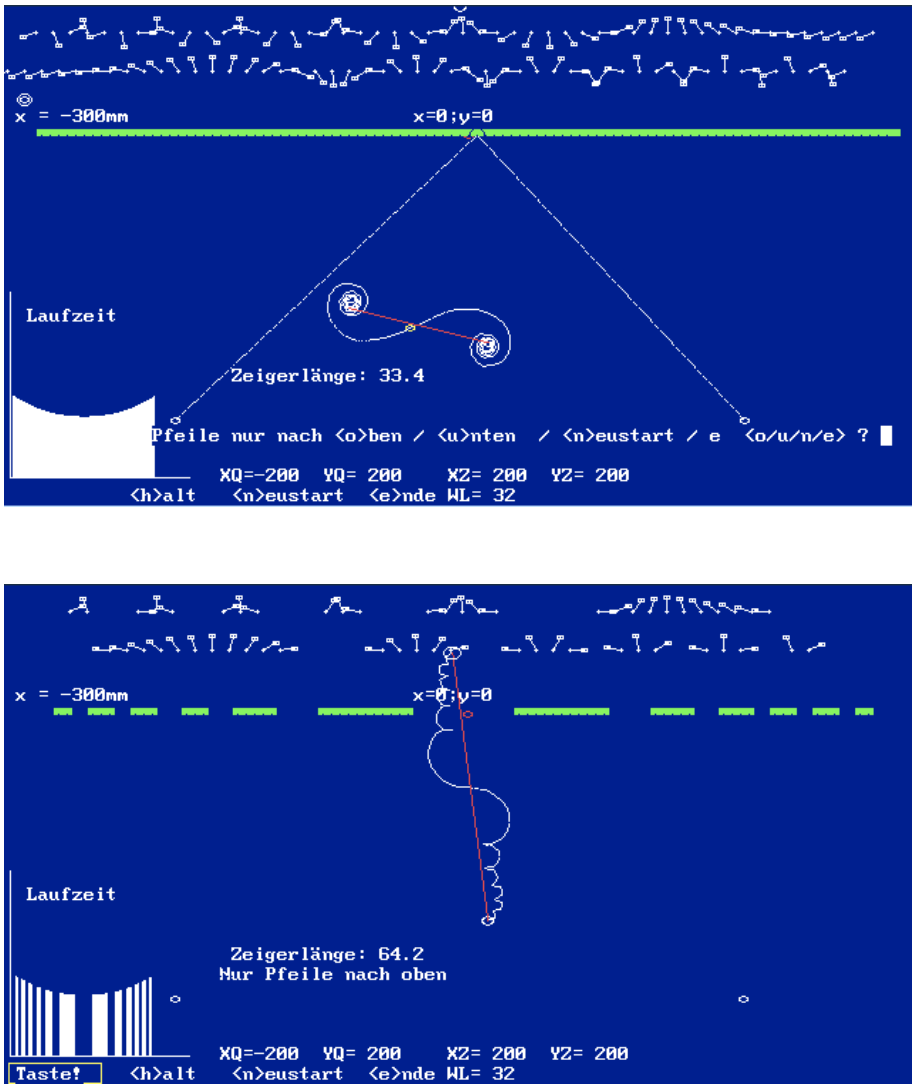


Abbildung 5.3: Animationen zur Reflexion mit dem Zeigerformalismus, Bild oben: Am oberen Bildrand sind die Drehungen der Zeiger für die einzelnen Pfade zu sehen. Man erkennt, dass nur die Zeiger der Pfade im dargestellten Reflexionsbereich zur Gesamtamplitude beitragen. Die gesamt Zeigerlänge ist 33,4. Bild unten: Aus der Reflexionsfläche wurden alle die Stellen weggeschnitten, deren Pfade eine Zeigerrichtung nach unten haben. Dies kann man im Vergleich der Zeiger am oberen Bildrand erkennen. Überraschenderweise ergibt sich eine Gesamtamplitude, die fast doppelt so groß ist. [Bader 1996]

sein, die von den Schülern in Partnerarbeit gelöst werden können. Die Auswertung der Ergebnisse der Arbeitsphase kann auf verschiedene Weise im Plenum erfolgen. So könnte man eine Expertenrunde initiieren, in der ein Team die Antworten vorstellt und das Auditorium hinterfragt kritisch die vorgestellten Informationen. Diese Herangehensweise erfordert aber, dass alle Schüler die gleichen Screenshots bearbeiten. Eine andere Variante ist die Aufteilung von verschiedenen Screenshots, wodurch unter den Gruppen eine Art Informationslücke geschaffen wird, die durch Vorträge geschlossen wird. Beide Varianten können ohne Computer durchgeführt werden. Allerdings ist es zwingend notwendig, dass die Schüler die Vorgehensweise entweder bereits kennen oder diese ausführlich vorgestellt wird. Das Verständnis über die Rolle der Schüler in einem derartigen Arbeitsprozess ist ein wichtiger Bestandteil für den Erfolg. Außerdem wird es sehr hilfreich sein, wenn zum Beispiel die Pfeiladdition von den Schülern am Computer selbst erfahren und verstanden wurde. Somit sollten die Schüler in der Lage sein, die Informationen auf den Screenshots zu verarbeiten. Zur Nutzung der Vielfalt an gebotenen Programmen in Baders Konzept ist es sehr wichtig, dass diese nicht einfach nur am Computer installiert werden und in Einzelarbeit von den Schülern benutzt werden. Dies birgt zwei große Probleme, zum einen werden die Schüler überfordert sein, zum anderen wird der Umgang mit den Programmen schnell monoton und somit langweilig. Dies führt nicht zu den gewünschten Lernerfolgen, die an den zuvor gesetzten Kompetenzzielen gemessen werden sollten.

QED Videomitschnitt der Vorlesungen in Auckland [VEGA 2001]

Abbildung 5.4: Richard Feynman - The Douglas Robb Memorial Lecture [VEGA 2001]

Es handelt sich um Originalaufnahmen zum später veröffentlichen Buch *QED - The Strange Theory of Light and Matter* von Feynman [Feynman 2006]. Das physikalische Sprachniveau ist basierend auf dem Konzept des Buches eher für

Laien gedacht. Damit sollte es keine allzugroße Schwierigkeit sein, den englischen Ausführungen zu folgen. Im besonderen lassen sich diese Videos ausschnittsweise mit den Animationen von Bader kombinieren, weil diese auf dem Buch *QED - The Strange Theory of Light and Matter* beruhen. Es ist möglich, Sequenzen der Videos nach Einführung in das Thema einzusetzen oder ausgewählte Sequenzen zum Spannungsaufbau als Einstieg in die Quantentheorie einzubinden (Abb. 5.4). Allerdings gilt in beiden Fällen, dass eine Vorbereitung der Vokabeln im Unterricht stattfindet. Daher ist es sinnvoll, den Schülern Höraufgaben zu geben und die Länge auf je 10 Minuten zu reduzieren, z.B. Feynmans Ausführungen zur Reflexion.

Licht im Medium frei nach Feynman [Komma 1994]

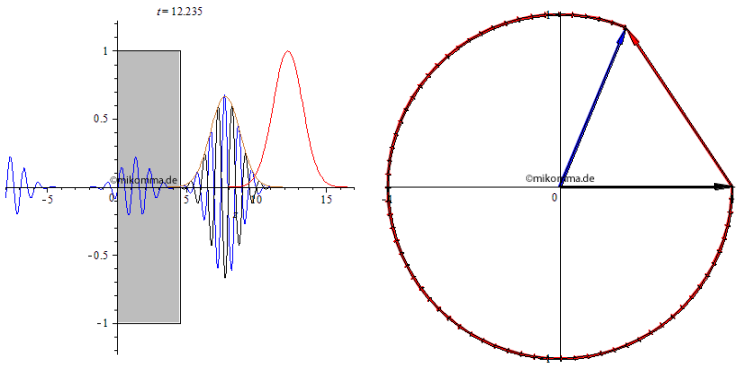


Abbildung 5.5: Animationen von Dr. Michael Komma- links: Darstellung zu Phasen- und Gruppengeschwindigkeit, rechts: Feynmans Phasenschieber [Komma 1994]

Die Erklärungen sind auf Deutsch mit beobachtbaren Animationen, dabei sind die Texte teilweise recht lang und es kann der Eindruck entstehen, Licht sei eine Welle. Damit wird auch der große Nachteil dieser Animantionen deutlich. Trotz der Ankündigung frei nach Feynman zu arbeiten, wird doch bis auf den Phasenschieber vollständig auf das Zeigermodell verzichtet. Dadurch wird der Gedanke bildlich verfestigt, Licht sei eine Welle. Weiterhin ist es nicht möglich einzelne Dinge anzusehen, denn es werden alle Animationen auf einer Seite simultan geladen. Beispielgebend sind im Folgenden einige Schlagwörter der Webseite aufgelistet

- Phasenschieber (Abb. 5.5)

- Iteration
- Huygens
- Phasen- und Gruppengeschwindigkeit (Abb. 5.5).

Es gibt noch eine Reihe anderen Themen aus der Quantenphysik, allergings, wie bereits festgestellt, ohne Verwendung des Zeigermodells. Einige Passagen sind sogar sehr formal mathematisch aufbereitet, so dass sie entweder nur im Wahlgegenstand Physik oder am Ende der zwölften Schulstufe eingesetzt werden können. So ist zum Beispiel eine vollständige Herleitung der Schrödingergleichung nach Feynman gegeben [Komma 1994]. Die in *Maple* erstellten Unterrichtsmaterialien zur modernen Physik erfordern eben diese Software zur Verwendung. Damit stellt sich neben technischen und didaktischen Hürden noch die finanzielle in den Weg die Unterlagen für den Unterricht zu verwenden. Des Weiteren werden auf einigen Links wie *Are There Quantum Jumps* Texte verwendet, die Teils im Original kopiert sind [Komma 1994]. Solche Texte sind zum einen für den Durchschnittsschüler und den Durchschnittsunterricht zu lang und zu kompliziert, zum anderen teilweise auf Englisch im Niveau C1, was zur Demotivierung beitragen kann. Allerdings kann man damit für interessierte und begabte Schüler Binnendifferenzierung planen.

Animationen der Universität Hannover [Christian 2000]

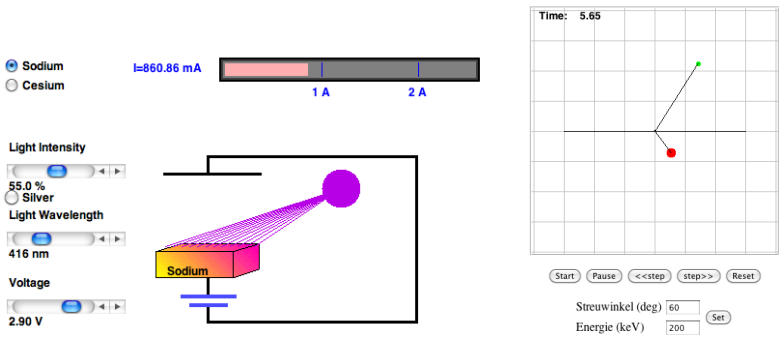


Abbildung 5.6: Animationen des Photoeffekts und des Comptoneffekts [Christian 2000]

Diese Webseite der Universität Hannover bietet drei direkte Links zu quantenphysikalischen Phänomenen. Allerdings wird nicht auf das Zeigermodell zur Beschreibung der Vorgänge zurückgegriffen, was eng damit verbunden ist, dass nur

eine sehr begrenzte Anzahl von Animationen geboten wird. Zwei der Animationen sind interaktiv und von Schülern aufgestellte Hypothesen können getestet werden. So werden Animationen zum

- Photoeffekt,
- Comptoneffekt und
- Laser

vorgestellt. In Abbildung (5.6) sind die Einstelllungsmöglichkeiten für den Photo- und Comptoneffekt zu sehen. Bei der Animation des Photoeffekts können das Material der Photozelle, die Energie des Lichts, Intensität des Lichts und die Gegenspannung eingestellt werden. Anhand eines Diagramms kann man weitere Auswertungen vornehmen und den Wert der Planckschen Wirkungsquantums berechnen. Die kurze Einleitung wie auch die vorgegebenen Aufgabenstellungen sind in Englisch, die auf dem Sprachniveau B1 sind. Somit stellen die Videos auf Grund des Lehrplans Englisch für die 7. und 8. Klasse der AHS kein sprachliches Problem dar [BMUKK-Englisch 2004], [CEFR 2001]. Die Animation des Comptoneffekts erlaubt den Streuwinkel und Energie des einlaufenden Photons einzustellen.

Einstieg in die Quantenphysik nach Embacher [Embacher 2000]

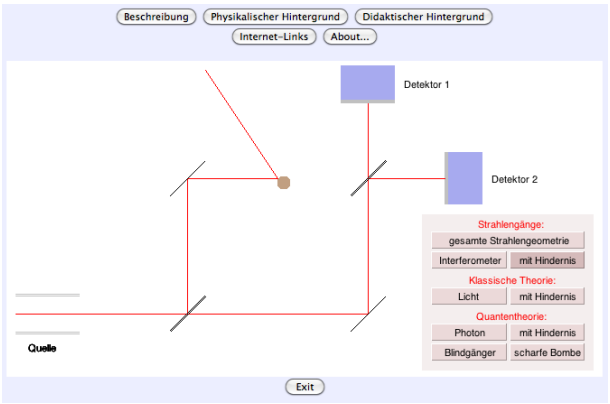


Abbildung 5.7: Animation des Mach-Zehnder-Interferometer [Embacher 2000]

Das vorgeschlagene Konzept besteht aus insgesamt 18 Kapiteln, wobei die ersten sieben Kapitel bereits schülerfreundlich ausformuliert sind. Zentrales Ele-

ment der ersten sieben Kapitel ist die Diskussion des Mach-Zehnder-Interferometers. Daran werden die zwei bekannten Modelle zur Beschreibung des Lichts diskutiert - Teilchenodell und Wellenmodell. Anhand von schematischen Darstellungen und verständlichen Textpassagen werden die Interpretationen der Modelle richtig gestellt, um Fehlvorstellungen zu verhindern. Licht wird nicht explizit nur als Teilchen oder Welle angesehen. Der Begriff Welle wird auch für das Licht verwendet, allerdings wird deutlich darauf hingewiesen, dass es sich dabei nicht um eine von uns wahrgenommene Welle handelt, sondern die Interpretation der Welle für die Beschreibung der Wahrscheinlichkeiten ein Quantenobjekt irgendwo im Raum anzutreffen. Damit bleibt die Diskussion der Quantentheorie an diesem Punkt stehen und die Feynmansche Idee mittels Zeigerformalismus findet keine direkte Erwähnung. Zumindest wird diskutiert, welche Wirkung ein Detektor auf einen der beiden Wege eines Interferometers hat. Allerdings erscheint auch das Ziel des Konzeptes in Richtung Quanteninformation und Quantencomputer gewichtet zu sein, so dass Feynmans Sicht zum Licht nicht im Mittelpunkt steht. Für den Einstieg ist eine Animationen zur Quantenbombe (Abb. 5.7) basierend auf dem Mach-Zehnder-Interferormeter verlinkt. [Embacher 2000]

Einführung in die Quantentheorie nach einem Konzept der Universität Ulm [Teider 2003]

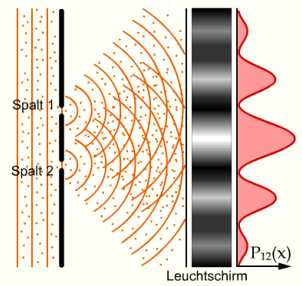


Abbildung 5.8: Animation des Doppelspaltversuchs [Teider 2003]

Das Konzept zur Einführung in die Quantentheorie besteht aus zwei Kapiteln zum Dualismus Welle-Teilchen und zum Aufbau der Atomhülle, zu denen jeweils mehrere Unterkapitel gehören. Die Texte werden mit interaktiven Animationen unterstützt und enthalten auch einfache mathematische Formalismen wie Betrachtungen der Wahrscheinlichkeiten beim Doppelspaltversuch. Alle Animationen sind ausführlich erklärt, es gibt aber keine begleitenden Aufgaben zum

Entwickeln, Festigen und Kontrollieren von Wissen oder Kompetenzen. Unter anderem werden das Strahlungsgesetz, der Photoeffekt, die Röntgenstrahlung und der Doppelspaltversuch vorgestellt. Andere quantentheoretische Beispiele wie Brechung und Reflexion werden nicht betrachtet. Es wird kein Bezug zum Zeigermodell und damit im Grunde genommen auch nicht zu Feynmans Grundprinzipien hergestellt. Die Webseite bietet unter anderem folgende Animationen an

- Photoeffekt - es kann der Eindruck entstehen, dass Licht eine Welle sei.
- Doppelspaltversuch - Formeln zur Wahrscheinlichkeitsaddition und zur Normierung (Abb. 5.8)
- Potentialtopfmodelle - mit Lösung der Wellengleichung und den daraus abgeleiteten Quantenzahlen

Münchener Internetprojekt zur Lehrerfortbildung in Quantenmechanik - MILQ [LMU-milq 2012]
MILQ ist ein Lehrgang für Lehrer. Er beginnt mit den Photonen und führt verschiedene quantenphysikalische Beispiele wie den Tunneleffekt oder die Unbestimmtheitsrelation ein. Es gibt am Ende jeder Einheit einen Kontrollbogen zur Selbstüberprüfung. Bezüge zur Quantentheorie nach Feynman gibt es keine, so fehlen auch die quantenphysikalische Beschreibung von Reflexion und Brechung. Einige Teile der Animationen funktionieren nur auf Windows-basierenden Plattformen, was zu Einschränkungen bei der Nutzung im Unterricht führen kann, wenn nur MacIntosh-Plattformen vorhanden sind. In der Erweiterung des Lehrganges finden sich Beschreibungen von verschiedenen Unterrichtskonzepten zur Quantentheorie, unter anderem ist auch der Ansatz von Bader basierend auf dem Zeigerformalismus beschrieben. Wie bereits angedeutet, ist der Zeigerformalismus nicht Bestandteil des Basiskurses. Weiters bleibt kritisch zu hinterfragen, warum sich der Lehrgang nur an Lehrer richtet. Die Inhalte des Basiskurses sind so aufbereitet, dass sie im Unterricht eingesetzt werden könnten. Erst der Erweiterungsteil, der sich unter anderem mit Unterrichtskonzepten und Schülervorstellungen beschäftigt, ist nicht mehr so sinnvoll für Schüler. [LMU-milq 2012]

Leifi G8 Klasse 11/12 Quantenphysik - Didaktik der Universität München [Leifi 2012]
Die Seite orientiert sich am Lehrplan für Physik an Gymnasien im Freistaat Bayern. Es ist eine Materialsammlung sowie eine Beschreibung von Inhalten.

Die Animationen sind teils plattformunabhängig, teils nur für Windows-Plattformen. Die begleitenden Texte sind schülergerecht verfasst worden. An einigen Stellen gibt es auch interaktive Kontrollmöglichkeiten für das vermittelte Wissen, zum Beispiel für den Photoeffekt. Diese umfangreiche Internetsammlung kann Ausgangspunkt für Aufgabenstellungen mit kompetenzorientiertem Charackter sein. Dazu muss man sich aber erst noch passende Arbeitsblätter entwickeln, die die Schüler bei der Erschließung der Seite und der Entwicklung von Kompetenzen anleiten. Allerdings gibt es wieder nichts direkt zu Feynmans Grundprinzipien der Quantentheorie und es werden auch nur die üblichen Experimente beschrieben [Leifi 2012]. Dazu gehören:

- der Photoeffekt in mehreren Varianten,
- das Doppelspaltexperiment und
- der Franck-Hertz Versuch unter dem Thema Atommodell der Quantenphysik.

Visual Quantum Mechanics - University of Kansas [KSU 2004]

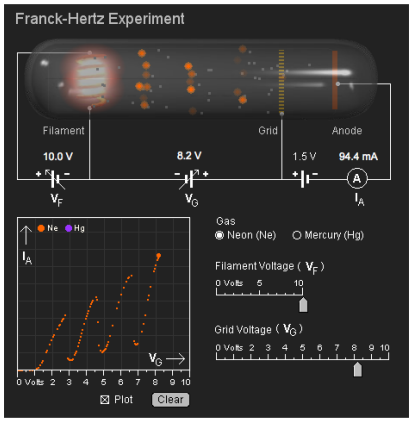


Abbildung 5.9: Animation des Franck-Hertz Versuchs [KSU 2004]

Es gibt verschiedene interaktive und plattformunabhängige Animationen, die allerdings teilweise ohne jede Beschreibung und Erklärung sind. Die Messwerte sind gut ablesbar und erlauben eine quantitative Auswertung der Versuche. Allerdings gibt es wegen der fehlenden Erklärungen keine Bezüge zu den verwendeten physikalischen Modellen. Daher ist eine Aufarbeitung mit Hilfe eines Ar-

beitsblattes zwingend erforderlich, bevor diese Animaitonen im Unterrich eingesetzt werden können. Insbesondere der Versuch nach Franck-Hertz erlaubt eine wahrscheinlichkeitstheoretische Behandlung der Quantentheorie, wenngleich dies nicht im Sinne der Feynmanschen Grundprinzipien ist. Eine ausführliche Beurteilung einiger Animationen findet man unter Doubek [Doubek 2004]. Zu den auf der Seite verlinkten Animationen gehören unter anderem

- Franck-Hertz (Abb. 5.9),
- Zeeman Spektroskopy und
- Wahrscheinlichkeitsillustrator.

Phyik Oberstufe Zusatzmaterial [Lindner 2010]

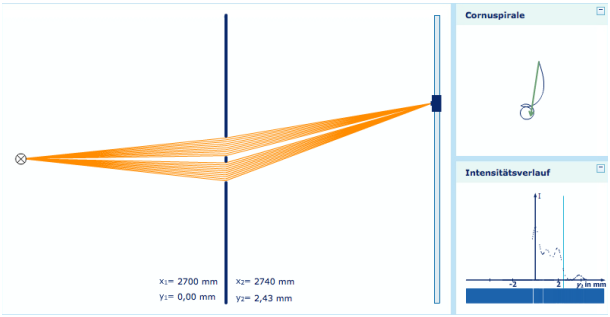


Abbildung 5.10: Beugungsversuch mit Zeigerformalismus [Lindner 2010]

Zum Kapitel Licht, nicht wie man vermuten würde unter Quantenphysik, findet man zwei Animationen zur Zeigeroptik und zur Beugung am Spalt als Online-Ergänzungsmaterial zum Lehrbuch. Beide Animationen sehen so ähnlich aus wie die vom Konzept nach Bader. Ein großer Vorteil beider Animationen ist die Plattformunabhängigkeit. Die Schüler haben die Möglichkeit verschiedene Parameter wie die Spaltanzahl, die Wellenlänge und anderes einzustellen. Als etwas nachtteilig stellt sich neben der unglücklichen Zuordnung zum Kapitel Licht weiterhin dar, dass die Entwicklung der Zeigeraddition nicht mehr so gut wie bei Bader nachvollzogen wird und somit die Zeigerdarstellung etwas mystisch wird. Daher sollte man diese Animationen erst zur Festigung einsetzen, wenn klar ist, wie sich diese Zeigerbilder ergeben. Wenn man die Animation startet wird für jeden Pfad in der Cornuspirale eine kleine Amplitude eingetragen (Abb. 5.10). Durch das Verschieben des Detektors erhält man für jeden

Messpunkt eine solche Zeigeraddition, die auch in ein Diagramm eingetragen wird. Zu der Animation gibt es weitere Informationen, eine Aufgabe und eine Anleitung. [Lindner 2010]

Mark's Quantum Mechanis Applets [Sutherland 2012]

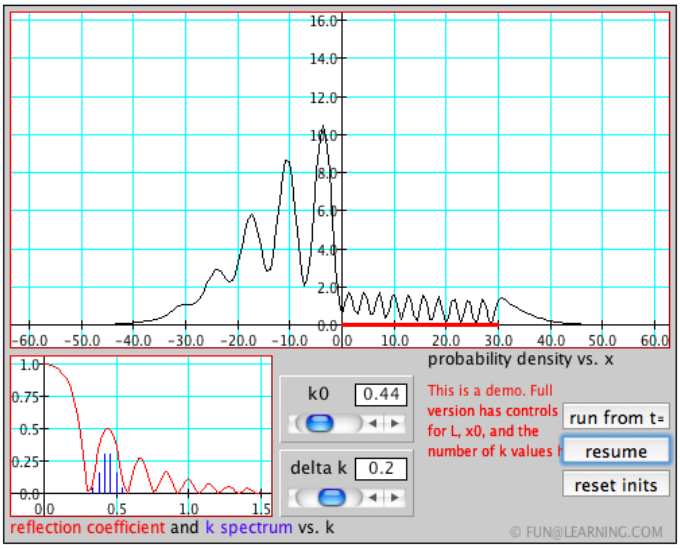


Abbildung 5.11: Animation zur eindimensionalen Streuung, bei der auch die Wechselwirkung im Bereich der Streuzone zu sehen ist, dies wurde in den Ausführungen der Arbeit bisher nicht berücksichtigt [Sutherland 2012]

Es handelt sich um eine Seite mit englischen Beschreibungen, die auf B2-Niveau sind [CEFR 2001]. Allerdings beinhalten die Ausführungen zum Teil mathematische Formalismen, die eher für das Wahlpflichtfach geeignet sind. Die Animationen sind interaktiv und ihre Benutzung ist kurz beschrieben. Für interessierte und mathematisch begabte Schüler sind diese Animationen besonders geeignet. Der Zeigerformalismus oder Feynmans Grundprinzipien der Quantentheorie finden auch hier keine Erwähnung, wie es schon bei vielen anderen Quellen der Fall war. Es gibt Animation zu

- Heisenbergsche Unschärferelation - Impulsunschärfe kann eingestellt werden, um zu beobachten, wie sich die Ortsunschärfe verhält,
- Teilchenstreuung - es wird auch auf das Nahfeld eingegangen, d.h. die

genaue Wechselwirkung im Bereich der Streuung aufgezeigt, wie sie in dieser Diplomarbeit nicht besprochen worden sind (Abb. 5.11) und

- Potenialtopf - Amplitude der Zustände einstellbar, Beobachtung der Auswirkung

Zusammenfassung
Abschließend muss man sagen, dass es eine Vielzahl von Animationen im Internet und als Zusatzmaterial zu Lehrbüchern gibt, die das Thema Quantenphysik behandeln. Im Grunde genommen ist aber nur die Ausarbeitung von Bader sehr nah am Zeigerformalismus und den Feynmanschen Grundprinzipien der Quantentheorie. Gerade dieses Material ist nicht mehr im Handel erhältlich. Wie in der Arbeit dargestellt wurde, kann man selbst Alltagsphänomene wie die Reflexion und Brechung mittels des Zeigerformalismus erklären, ohne dabei die Gültigkeit in der Quantentheorie zu verlieren. Der Zeigerformalismus ist daher nicht nur ein mächtiges Werkzeug für die Physik, sondern auch für die Vermittlung von anschaulicher Physik in der Schule.

5.2 Hochschuldidaktische Einstiege in die Quantentheorie

Die Einführung in die Quantentheorie wird in vielen Lehrbüchern und Vorlesungsskripten mit

- der Rutherfordstreuung,
- der Comptonstreuung,
- dem Potentialtopf als Vorbereitung für das Wasserstoffproblem,
- der Potentialbarrie als Grundlage für den Tunneleffekt und den α-Zerfall,
- dem δ-Funktional, dem sogenannten Dirac-Potential,

und anderen Beispielen aufgebaut, die mit den konventionellen Grundprinzipien von Kapitel (2.2) betrachtet werden. Außerdem zeigen diese Einführungen auch, dass die klassische Physik ein Grenzfall der Quantenphysik ist [Schwabl 2007, Cohen-Tannoudji 2007, Reineker 2008, Basdevant 2002]. Eine Auswahl dieser Beispiele wurde im Kapitel (3) vorgestellt. Die folgende Liste ist eine Übersicht von Vorlesungsskripten, die auf den konventionellen Betrachtungen der Quantentheorie in dieses Gebiet einführen. Zu diesen Vorlesungen gehören

- Theoretische Physik 3, gehalten von Prof. Dr. Rieger an der Universität des Saarlandes im Sommersemester 2012 unter Verwendung der Schrödingergleichung und den Eigenwertproblemen [Rieger 2012],
- Quantenmechanik 1, gehalten von Prof. Dr. Renner an der ETH Zürich im Herbstsemester 2011 mit Behandlung der Schrödingergleichung und den Eigenwertproblemen [Renner 2011],
- Physics of Quantum Mechanics, gehalten von Prof. Dr. Binney an der Oxford University im Wintersemester 2009 als sehr detailierte Videoversion unter Verwendung der konventionellen Betrachtung der Quantenmechanik [Binney 2009],
- Quantenmechanik 1, gehalten von Prof. Dr. Gros an der J.W. Goethe Universität zu Frankfurt am Main im Sommersemester 2006 basierend auf der Schrödingergleichung und verschiedenen Eigenwertproblemen [Gros 2006],
- Quantum Mechanics 1, gehalten von Prof. Dr. Walet an der University of Manchester im Sommersemester 2005 unter Verwendung der Schrödingergleichung [Walet 2005] und
- Quantenmechanik 1, gehalten von Prof. Dr. Blatter an der ETH Zürich im Herbstsemester 2005 wobei besonders Augenmerk auf den Matrizenformalismus gelegt wurde [Blatter 2005].

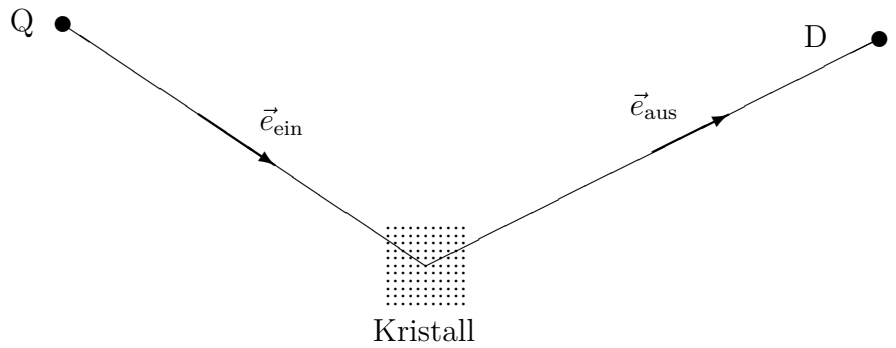
Angefangen mit dem Lehrband *The Feynman Lectures on Physics Volume III* aus dem Jahr 1965 gibt es aber auch Ansätze, den Einstieg in die Quantentheorie mittels Additions- und Multiplikationsregeln der Wahrscheinlichkeitsamplitude zu wählen [Feynman 2010]. So findet man in den Übungsserien und Literaturangaben zur Vorlesung *Quantenmechanik 1*, die von Prof. Dr. Anastasiou im Herbstsemester 2012 an der ETH Zürich gehalten wird, Anknüpfungen an die vorgegebenen Wahrscheinlichkeitsamplituden von Quantenteilchen, die von einem Punkt x_i zu einem Punkt x_f gelangen sollen und dabei mit Potentialen wechselwirken [Anastasiou 2012]. Zum Veröffentlichungszeitpunkt dieser Diplomarbeit hat kein Vorlesungsskriptum vorgelegen. An den drei Beispielen zu Einstiegsvorlesungen für die Quantenmechanik an der ETH Zürich zeigt sich, dass es keine curricularen Vereinbarungen über Inhalte und Kompetenzen gibt, die den Studierenden vermittelt werden sollen. An der Universität Potsdam hat Prof. Dr. Spahn in einem Kapitel seines Vorlesungsskripts *Quantenmechanik 1* das Wesen der Pfadintegrale für Berechnungen in der Quantenmechanik im Sommersemsester 2008 eingeführt und den Ausbreitungskern für freie Teilchen

in einer Übung berechnen lassen [Spahn 2008].
An der Universität Wien wurde im Sommersemester 2012 die Vorlesung *Theoretische Physik 2 - Quantenmechanik 1* von A. o. Univ. Prof. Dr. Neufeld zur Einführung in die Quantentheorie gehalten. Im Skript zur Vorlesung findet sich folgende Kapitelzusammenfassung,

> Anhand eines Streuexperiments werden die Spielregeln der Quantentheorie erläutert. Zu jedem Ereignis gibt es eine komplexe Wahrscheinlichkeitsamplitude, deren Absolutquadrat die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten des Ereignisses angibt. Gibt es mehrere ununterscheidbare Möglichkeiten für den Übergang eines physikalischen Systems von einem gegebenen Anfangszustand in einen bestimmten Endzustand, so werden die entsprechen Amplituden addiert. Zerlegt man eine Amplitude in verschiedene (z.B. hintereinander stattfindende) Teile, so werden die dazugehörigen Teilamplituden miteinander multipliziert. [Neufeld 2012]

die zeigt, dass einzelne Abschnitte dieser Vorlesung und Aufgaben des Übungsseminars an die Betrachtung der Quantenphysik aus dem Lehrwerk *The Feynman Lectures on Physics Volume III* [Feynman 2010] angelehnt sind. In den Übungen zur Vorlesung hatten die Studenten folgende Beispiele zu bearbeiten:

Neutronenbeugung



An den Punkten $\vec{x}_{\vec{n}} = a\vec{n}$, $\vec{n} \in \mathbb{Z}^3$, $n_i = -N, -N+1, \ldots, N$ $(i = 1, 2, 3)$ befinden sich die Atome eines Kristallgitters. Von einer am Punkt $\vec{x}_{\text{Q}} = -R_{\text{Q}}\,\vec{e}_{\text{ein}}$ $(|\vec{e}_{\text{ein}}| = 1)$ befindlichen Quelle Q

($R_\mathrm{Q} \gg Na$) werden Neutronen mit dem Impuls p emittiert. Am Punkt $\vec{x}_\mathrm{D} = R_\mathrm{D}\,\vec{e}_\mathrm{aus}$ ($|\vec{e}_\mathrm{aus}| = 1$) befindet sich ein Neutronendetektor ($R_\mathrm{D} \gg Na$). Die Amplitude $\langle \mathrm{D\,aus}|\mathrm{Q\,ein}\rangle$, dass das bei Q emittierte Neutron im Detektor D nachgewiesen wird, ist von der Form

$$\langle \mathrm{D\,aus}|\mathrm{Q\,ein}\rangle \sim \sum_{\vec{n}} \frac{e^{ip|\vec{x}_\mathrm{Q}-\vec{x}_{\vec{n}}|/\hbar}}{|\vec{x}_\mathrm{Q}-\vec{x}_{\vec{n}}|} W_{\vec{n}} \frac{e^{ip|\vec{x}_\mathrm{D}-\vec{x}_{\vec{n}}|/\hbar}}{|\vec{x}_\mathrm{D}-\vec{x}_{\vec{n}}|}.$$

(Mehrfachstreuung wird vernachlässigt.) Berechnen Sie diesen Ausdruck unter der Annahme, dass $W_{\vec{n}}$ für alle Atome gleich ist. Verwenden Sie für $|\vec{x}_\mathrm{Q}-\vec{x}_{\vec{n}}| = \sqrt{(\vec{x}_\mathrm{Q}-\vec{x}_{\vec{n}})^2}$ eine Näherungsformel, die der Tatsache Rechnung trägt, dass $|\vec{x}_\mathrm{Q}| = R_\mathrm{Q} \gg |\vec{x}_{\vec{n}}|$ ist. (Analog für $|\vec{x}_\mathrm{D}-\vec{x}_{\vec{n}}|$.) Auf diese Weise sollten Sie den Ausdruck

$$\langle \mathrm{D\,aus}|\mathrm{Q\,ein}\rangle \sim \sum_{\vec{n}} e^{ipa\vec{\Delta}\cdot\vec{n}/\hbar} = \prod_{i=1}^{3} \sum_{n_i=-N}^{N} e^{ipa\Delta_i n_i/\hbar}, \quad \vec{\Delta} = \vec{e}_\mathrm{ein} - \vec{e}_\mathrm{aus}$$

erhalten. Man muss also eine geometrische Reihe vom Typ

$$s(\alpha) = \sum_{n=-N}^{N} e^{i\alpha n}$$

berechnen. Zeigen Sie, dass die Summation

$$s(\alpha) = \frac{\sin\alpha(N+\frac{1}{2})}{\sin\frac{\alpha}{2}}$$

ergibt. Diskutieren Sie das Verhalten dieser Funktion. Für welche Werte von α hat sie scharfe Extrema? Zeigen Sie, dass man daher bei der Neutronenbeugung an dem Kristall für

$$\frac{pa}{2\pi\hbar}\vec{\Delta} = \vec{\nu} \in \mathbb{Z}^3$$

scharfe Interferenzmaxima beobachtet. Das ist die Lauesche Interferenzbedingung für ein einfaches kubisches Gitter. Man kann sie auch in der Form

$$\frac{a}{2\pi}(\vec{k}_\mathrm{ein} - \vec{k}_\mathrm{aus}) = \vec{\nu} \in \mathbb{Z}^3$$

schreiben. [Neufeld 2012],

in dieser Aufgaben sollten die Studenten anhand einer vorgegebenen Amplitude die Wahrscheinlichkeit berechnen, mit der die Neutron durch einen Kristall in einen Detektor D gestreut werden.
In einer anderen Übungsaufgabe wurde die Wechselwirkung eines Teilchens mit zwei Deltapotentialen betrachtet:

Feynmanregeln
Gegeben ist der Hamiltonoperator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \lambda_1\,\delta(x - x_1) + \lambda_2\,\delta(x - x_2), \quad 0 < x_1 < x_2. \tag{5.1}$$

Die Energieeigenfunktion ($E = \hbar^2 k^2/2m$) für ein von links mit Impuls $\hbar k > 0$ einlaufendes Teilchen hat die Form

$$(e^{ikx} + Re^{-ikx})\theta(x_1 - x) + (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})\theta(x - x_1)\theta(x_2 - x) + Te^{ikx}\theta(x - x_2). \tag{5.2}$$

Bestimmen Sie die störungstheoretische Entwicklung der Amplituden R, T, A, B bis inkl. Terme quadratisch in $\lambda_{1,2}$ durch Anwendung der folgenden Feynmanregeln:

1. Die Amplitude für die freie Bewegung eines Teilchens mit Impuls $p = \hbar k$ vom Ort x_i zum Ort x_f ist durch $\exp(ik|x_f - x_i|)$ gegeben.
2. Die Amplitude für eine *einmalige* Wechselwirkung mit dem am Ort $x_{1,2}$ befindlichen Deltapotential ist $-i\alpha_{1,2}$, wobei $\alpha_n = m\lambda_n/\hbar^2 k$ $(n = 1, 2)$ ist.

Hinweis: Unterscheiden Sie die drei Fälle $0 < x < x_1$ (Bestimmung von R), $x_1 < x < x_2$ (Bestimmung von A, B) und $x > x_2$ (Bestimmung von T). Zeichnen Sie die entsprechenden Diagramme! Sie können o. B. d. A. annehmen, dass das Teilchen bei $x = 0$ startet. [Neufeld 2012]

Dieses Beispiel wurde im Kapitel (4.8) vorgestellt. Zur Lösung der Aufgabe werden die Addition der Wahrscheinlichkeitsamplituden alternativer Wege zwischen zwei Punkten und die Multiplikation der Wahrscheinlichkeitsamplituden entlang eines Weges verwendet, die im Kapitel (2.3) eingeführt wurden. In der sich anschließenden Aufgabe wird der Bezug zur konventionellen Betrachtung der Quantenmechanik hergestellt, in dem die Studenten folgende Aufgabe bearbeiteten:

Entwicklung der vollständigen Lösungen

Die vollständigen Lösungen für die vier Amplituden von Bsp. 41 lauten:

$$
\begin{aligned}
R &= \frac{-i\alpha_1 e^{2ikx_1} - i\alpha_2 e^{2ikx_2} - \alpha_1\alpha_2(e^{2ikx_2} - e^{2ikx_1})}{1 + i\alpha_1 + i\alpha_2 + \alpha_1\alpha_2(e^{2ik(x_2-x_1)} - 1)}, \\
T &= \frac{1}{(1+i\alpha_1)(1+i\alpha_2) + \alpha_1\alpha_2 e^{2ik(x_2-x_1)}}, \\
A &= \frac{1+i\alpha_2}{(1+i\alpha_1)(1+i\alpha_2) + \alpha_1\alpha_2 e^{2ik(x_2-x_1)}}, \\
B &= \frac{-i\alpha_2 e^{2ikx_2}}{(1+i\alpha_1)(1+i\alpha_2) + \alpha_1\alpha_2 e^{2ik(x_2-x_1)}}.
\end{aligned}
$$

(a) Entwickeln Sie die Amplituden R, T, A, B bis zur quadratischen Ordnung in $\alpha_{1,2}$ und vergleichen Sie mit dem Ergebnis der vorherigen Aufgabe.

Die zunehmende Beliebheit der Feynmanschen Betrachtung der Quantentheorie steht didaktisch eng mit den anschaulich zu interpretierenden Ergebnissen der Rechnungen wie in Kapiteln (4.7) bis (4.11) in Verbindung. Allerdings beschränken sich alle vorgestellten Varianten auf die Betrachtung der Wahrscheinlichkeitsamplituden, ohne diese mittels Pfadintegrale zu berechnen [Neufeld 2012]. Um Pfadintegrale zu behandeln, werden dann entweder Spezialveranstaltungen oder Vorlesungen zur *Quantenmechanik 2* gehalten.
Allerdings wurde während der Recherche für die Diplomarbeit bereits ein Lehrwerk zur Einfürhung in die Quantenmechanik gefunden, das auf den Feynmanschen Grundprinzipien und den Pfadintegralen aufbaut. Dieser Zugang ermöglicht wieder eine anschauliche Darstellung für verschiedenste quantentheoretische Probleme inklusive der Berechnung der Wahrscheinlichkeitsamplituden [Reinhardt 2012].

A Anhang - Prinzip der kleinsten Wirkung

Feynman benutzt für die Betrachtungen des Pfadintegrals die Suche nach einem Funktional $S[f]$, das für eine bestimmte Funktion einen minimalen Wert annimmt. Dabei sind die Anfangs- und Endbedingung für die verschiedenen Funktionen gleich, d.h. ein Teilchen startet zum Zeitpunkt t_1 an einem Ort x_1 und gelangt auf irgendeinem Weg zum Zeitpunkt t_2 an den Ort x_2. Da es sich um eine Extremwertaufgabe handelt, muss die Ableitung des Funktionals den Wert Null haben [Feynman 1965].
Als Beispiel nutzt Feynman einen Körper, der im Graviationsfeld nach oben geworfen wird und auf einer bestimmten Höhe zu einer bestimmten Zeit sein soll. Dies kann auf verschiedene Weise geschehen. Die passende Funktion ist gerade eine quadratische Funktion zwischen Weg und Zeit. Aber man könnte sich auch vorstellen, dass sich Körper zu Beginn ganz schnell bewegt. Dann müsste eine große Verzögerung wirken, damit der Körper vom gleichen Anfangspunkt zum gleichen Endpunkt in der gleichen Zeitdifferenz gelangen könnte. Im zweiten Fall wird aber mehr Energie benötigt als im ersten Fall mit der angenommenen quadratischen Funktion. Die Definition der Wirkung S für nicht relativistische Probleme lautet

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \Big(E_{kin} - V\Big) dt = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{mv^2}{2} - V\right) dt \,. \tag{A.1}$$

Dabei muss der Wert für die Wirkung S eines Prozesses einen minimalen Wert annehmen. Nun ist aber hier ein Integral als Ansatz gegeben und keine Funktion, daher kann man nicht einfach differenzieren, um die Lösung der Extremwertaufgabe zu finden. Als Lösungsansatz wird vorgeschlagen

$$s(t) = x_0(t) + \eta(t) \,, \tag{A.2}$$

d.h. die Variation der Variablen. Die Funktion $x_0(t)$ für das Minimum der Wirkung ist nicht bekannt. Man bedient sich des Tricks, dass man sich überlegt, wie eine Variante der Funktion mit einer kleinsten Abweichung aussehen müsste. Diese virtuelle Funktion darf an den Anfangs- und Endpunkten nicht von der Funktion der tatsächlichen Bewegung für das Minimum des Funktionals

abweichen, woraus sich folgende Bedingungen ergeben:

$$\begin{aligned} \eta(t_1) = \eta(t_2) &= 0 \\ x(t_1) = x_0(t_1) &= x_1 \\ x(t_2) = x_0(t_2) &= x_2 \,. \end{aligned} \tag{A.3}$$

Die weitere Bedingung ist, dass für die Funktion des Minimums des Funktionals, dann die erste Ableitung des Funktionals nicht variieren darf, also Null sein muss. Damit muss

$$\frac{\delta}{\delta f} S[f] = 0 \tag{A.4}$$

eingehalten werden. Feynman stellt diesen Formalismus in der klassischen Physik für einen senkrechten Wurf vor, erweitert dies dann auf drei Dimensionen und die relativistische Physik und geht dann kurz auf die Quantenphysik mit den Phasenwinkel ein, bevor er dann den Bogen zur Elektrizität mit der Berechnung von Kapazitäten schließt, dabei verwendet er im Prinzip immer das gleiche Verfahren

1. Variation der Wirkung
2. Partielle Integration

Dieses Vorgehen wird im Folgenden am Beispiel des senkrechten Wurfs in z-Richtung aufgezeigt. Dazu werden hier die kinetische Energie und die potentielle Energie des Teilchens betrachtet. Die Gleichung für die Wirkung S lautet dann

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{m}{2} \left[\frac{d\,z(t)}{d\,t} \right]^2 - m\,g\,z(t) \right) dt \,. \tag{A.5}$$

Als erstes wird die Funktion $z(t)$ variiert, dabei ist $z_0(t)$ die gesuchte wahre Funktion, die den Wurf mit dem minimalen Wert der Wirkung ablaufen lässt. Durch die Variation der Variablen erhält man

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{m}{2} \left[\frac{d\,z_0(t)}{d\,t} + \frac{d\,\eta(t)}{d\,t} \right]^2 - m\,g\,\Big(z_0(t) + \eta(t) \Big) \right) dt \,. \tag{A.6}$$

Dieses Integral kann man nicht einfach so lösen, man muss sich einiger Tricks bedienen und die Randbedingungen einhalten. So kann man das Potential in einer Taylorreihe entwickeln, die nur bis zur ersten Ordnung berechnet werden

muss. Dies genügt der oben getroffen Bedingung, dass sie hier bei der Variation für die wahre Funktion verschwindet. Die gleiche Überlegung gilt für die kinetische Energie.
Es ergibt sich durch die Taylorentwicklung mit anschließender Separation der Funktionen für die kleinste Wirkung und die Variation

$$S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{m}{2} \frac{d^2 z_0(t)}{d t^2} - V(z_0) + m \frac{d z_0(t)}{d t} \frac{d \eta(t)}{d t} - V'(z_0)\eta(t) + O(\eta)^2 \right) dt \,, \tag{A.7}$$

worin aus Übersichtsgründen das allgemeine Potential $V(z_0) = mgz_0(t)$ und dessen Ableitung $V'(z_0) = mg$ eingesetzt wurden. Die wahre Funktion kennt man noch nicht, daher arbeitet man mit der Variation weiter. Es ergibt sich für die Variation der Wirkung folgende Gleichung

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left(m \frac{d z_0(t)}{d t} \frac{d \eta(t)}{d t} - V'(z_0)\eta(t) \right) dt \,, \tag{A.8}$$

die den zweiten Schritt eröffnet. Als zweiter Schritt wird nun die partielle Integration mit dem Term der kinetischen Energie durchgeführt und es ergibt sich folgender Term:

$$\int_{t_1}^{t_2} \left(m \frac{d z_0(t)}{d t} \frac{d \eta(t)}{d t} \right) dt = m \frac{d z_0(t)}{d t} \eta(t) \Big|_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \left(m \frac{d^2 z_0(t)}{d t^2} \eta(t) \right) dt \,, \tag{A.9}$$

der weiter vereinfacht wird. Der erste Teil dieses Terms ist Null, denn die Variation η ist an den Stellen t_1 und t_2 Null. Damit bleibt nur noch das zweite Integral übrig, indem die Variation nicht mehr nach der Zeit abgeleitet ist. Es ergibt sich für die Variation der Wirkung S folgendes Integral

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\left[m \frac{d^2 z_0(t)}{d t^2} - V'(z_0) \right] \eta(t) \right) dt \,. \tag{A.10}$$

Dieses Integral muss für das Prinzip der kleinsten Wirkung Null werden. Wenn die Variation η einen Wert hat, dann muss der folgende Term Null sein, damit das Produkt Null ist. Somit ergibt sich

$$0 = m \frac{d^2 z_0(t)}{d t^2} - V'(z_0) \tag{A.11}$$

als Lösung des Problems. Dies entspricht gerade der klassischen Definition der Kraft, die auf ein Teilchen im Gravitationsfeld wirkt, denn die räumliche Ableitung eines Potentialfeldes $V(z_0)$ ergibt eine Kraft, die auf das Teilchen wirkt. Im anderen Term liegt die Proportionalität mit der zweiten Ableitung des Weges nach der Zeit vor, also die Beschleunigung.

B Anhang - Varianten des Grundprinzips 4

In diesem Anhang werden drei verschiedene Varianten des Erwartungswerts für die konventionelle Betrachtung der Quantentheorie beschrieben, die von der Art des Spektrums anbhängen [Cohen-Tannoudji 2007].

Betrachtung des nichtentarteten, diskreten Spektrums
Es wird angenommen, dass das Eigenwertspektrum des Operators A diskret ist. Wenn die Eigenwerte a_n des Operators A nichtentartet sind, so gehört zu jedem Eigenwert a_n genau ein linear unabhängiger Eigenvektor $|u_n\rangle$, so dass

$$A|u_n\rangle = a|u_n\rangle \tag{B.1}$$

gilt. Jeder Zustand $|\psi\rangle$ eines Systems wird durch messbare physikalische Größen $\mathcal{A}$ beschrieben. Um die Wahrscheinlichkeit $\mathcal{P}(a_n)$ eines Erwartungswertes eines Eigenwertes a_n bei einer Messung zu bestimmen, zerlegt man den Zustandsvektor $|\psi\rangle$ auf Grund der Linearität des Zustandsraumes $\mathcal{H}$ in eine Summe aus normierten Eigenvektoren $|u_n\rangle$. Die Eigenvektoren eines Operators als Repräsentant einer physikalischen Größe sind als Basis des Zustandsraumes $\mathcal{H}$ zu verstehen, die durch folgenden Zusammenhang mit dem Zustandsvektor $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n|u_n\rangle \tag{B.2}$$

verbunden sind. Die Wahrscheinlichkeit $\mathcal{P}(a_n)$ bei einer Messung der Observablen $\mathcal{A}$ den Wert a_n zu messen ist für ein nichtentartetes, diskretes Spektrum der Eigenwerte a_n durch

$$\mathcal{P}(a_n) = |c_n|^2 = |\langle u_n|\psi\rangle|^2 \tag{B.3}$$

gegeben. Dieser Zusammenhang ist eine Variante des Grundprinzip 4 der konventionellen Betrachtung der Quantenphysik.

Betrachtung des entarteten Spektrums
Ein anderer Fall ergibt sich, wenn die Eigenwerte a_n entartet und diskret sind, d.h. die Zuordnung von Eigenvektoren $|u_n^i\rangle$ ist nicht mehr eindeutig. Ein Eigenwert a_n kann mehreren linear unabhängigen Eigenvektoren $|u_n^i\rangle$ zugeordnet

sein. Damit lautet das Eigenwertproblem

$$A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle \qquad i = 1, 2, ..., g_n\,. \tag{B.4}$$

Für das entartete Spektrum lautet dann die Zerlegung des Zustandsvektors $|\psi\rangle$ in eine gefundenen Basis wie folgt

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle\,, \tag{B.5}$$

wobei die Größe g_n den Entartungsgrad eines entarteten Eigenwertes a_n bezeichnet. Jedem Eigenwert a_n ist dann im Eigenraum $\mathcal{H}_n$ eine Menge von orthonormierten Vektoren der From $\{|u_n^i\rangle\}(i = 1, 2, ..., g_n)$ zugeordnet, die zum Eigenwert a_n des Operators A eine Basis im Eigenraum $\mathcal{H}_n$ bilden. Die Summe aller Betragsquadrate der Koeffizienten c_n^i der zugehörigen Eigenvektoren $|u_n^i\rangle$ aus der Zerlegung des Zustandsvektors $|\psi\rangle$ ist die Wahrscheinlichkeit $\mathcal{P}(a_n)$ vom Operator A den entarteten Eigenwert a_n zu messen. Die Wahrscheinlichkeit $\mathcal{P}(a_n)$ ist

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2 \tag{B.6}$$

und wir haben eine zweite Variante des Grundprinzips 4 der konventionellen Betrachtung der Quantenphysik für den Erwartungswert eines entarteten Spektrums mit den Eigenwerten a_n.
Nun muss noch gezeigt werden, dass bei einem entarteten Eigenwert a_n die Wahl der Basis $\{|u_n^i\rangle\}$ die Wahrscheinlichkeit $\mathcal{P}(a_n)$ nicht beeinflusst. Ein Zustandsvektor $|\psi_n\rangle$ kann als Summe der Eigenvektoren $|u_n^i\rangle$

$$|\psi_n\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle \tag{B.7}$$

verstanden werden. In Gleichung (B.7) ist der Zustandsvektor $|\psi_n\rangle$ der zum Eigenraum $\mathcal{H}_n$ gehörende Teil vom Zustand des Systems $|\psi\rangle$. Damit ist $|\psi_n\rangle$ die Projektion P_n des Vektors $|\psi\rangle$ auf den Eigenraum $\mathcal{H}_n$. Die Koeffizienten c_n^i ergeben sich aus dem Skalarprodukt der Eigenvektoren $|u_n^i\rangle$ und dem Zustandsvektor $|\psi\rangle$. Damit kann man den Zustandsvektor $|\psi_n\rangle$ wie folgt schreiben

$$|\psi_n\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle\,. \tag{B.8}$$

Um den Vektor $|\psi_n\rangle$ des entarteten Wertes a_n zu erhalten, ist die Projektion P_n des Zustandsvektors $|\psi\rangle$ auf den Eigenraum $\mathcal{H}_n$ durch folgende Eigenschaft

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i| = \mathbb{1}\Big|_{\mathcal{H}_n} \tag{B.9}$$

normiert. Die Wahrscheinlichkeit $\mathcal{P}(a_n)$ ergibt sich aus dem Betragsquadrat des Zustandes $|\psi_n\rangle$

$$\begin{aligned}\langle\psi_n|\psi_n\rangle &= \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i\langle u_n^i|\, c_n^i|u_n^i\rangle| \\ &= \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i\, c_n^i|u_n^i\rangle\langle u_n^i||\\ &= \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^{\,2} = \mathcal{P}(a_n)\,,\end{aligned} \tag{B.10}$$

somit ist gezeigt, dass die Wahrscheinlichkeit $\mathcal{P}(a_n)$ einen entarteten Eigenwert zu messen, unabhängig von der Wahl der Basis $\{|u_n^i\rangle\}$ ist.

Betrachtung des kontinuierlichen Spektrums
In diesem Fall wird angenommen, dass das Spektrum des Operators A kontinuierlich und nichtentartet ist. Die für das Eigenwertproblem notwendigen Eigenvektoren $|v_\alpha\rangle$ bilden eine kontinuierliche Basis im Zustandsraum $\mathcal{H}$, so dass das Eigenwertproblem folgendermaßen

$$A|v_\alpha\rangle = \alpha|v_\alpha\rangle \tag{B.11}$$

notiert wird. Die Entwicklung des Zustandes $|\psi\rangle$ in diese kontinuierliche Basis lautet dann

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}\alpha\, c(\alpha)|v_\alpha\rangle\,. \tag{B.12}$$

Um dem Fall des kontinuierlichen Spektrums zu entsprechen, muss nun eine Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\alpha)$ formuliert werden. Die Wahrscheinlichkeit $d\mathcal{P}(\alpha)$ bezieht sich auf das Auftreten eines Ergebnisses des Zustandes $|\psi\rangle$ im Bereich zwischen α und $\alpha + \mathrm{d}\alpha$. Das entspricht einer eindimensionalen Betrachtung, die aber ohne weiteres auch auf drei Dimensionen also ein infinitesimal kleines Volumenelement d^3x erweitert werden kann. Diese Wahrscheinlichkeit lautet

$$\mathrm{d}\mathcal{P}(\alpha) = \rho(\alpha)\mathrm{d}\alpha\,, \tag{B.13}$$

in der der Ausdruck $\rho(\alpha)$ als Wahrscheinlichkeitsdichte bezeichnet wird. Die Wahrscheinlichkeitsdichte ergibt sich aus dem Betragsquadrat der Wahrscheinlichkeitsamplitude ergibt. Die Wahrscheinlichkeitsamplitude leitet sich aus (B.12) durch

$$c(\alpha) = \langle v_\alpha | \psi \rangle \tag{B.14}$$

ab und man findet für die Wahrscheinlichkeit $\mathrm{d}\mathcal{P}(\alpha)$ einen Wert α einer physikalische Größe $\mathcal{A}$ eines Zustandes $|\psi\rangle$ im Bereich zwischen α und $\alpha + \mathrm{d}\alpha$ zu messen, foldende Beziehung

$$\mathrm{d}\mathcal{P}(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 \mathrm{d}\alpha = |c(\alpha)|^2 \mathrm{d}\alpha \,. \tag{B.15}$$

Das ist eine weitere Variante der Formulierung des Grundprinzips 4 der konventionellen Betrachtung der Quantenphysik [Cohen-Tannoudji 2007, Schwabl 2007].

C Anhang - Wechselwirkung mit einem Dirac-Potential

In den folgenden Betrachtungen werden einige Rechenschritte für die Bestimmung der Amplituden R und T auf konventionielle Weise besprochen. Zuerst wird die Bestimmung der ersten Ableitung der Funktion $\psi_k(x)$ für die Wechselwirkung mit einem Dirac-Potential gezeigt

$$\begin{aligned}\psi_k(x) =&\Big(e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) + T(k)e^{ikx}\Theta(x)\\ &\text{Produktregel der Differentiation}\\ &\text{sowie } \Theta'(-x) = -\delta(x) \text{ und } \Theta'(x) = \delta(x)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_k'(x) =&ik\Big(e^{ikx} - R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) - \Big(e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}\Big)\delta(-x)\\ &+ ikT(k)e^{ikx}\Theta(x) + T(k)e^{ikx}\delta(x)\\ &\text{mit } f(x)\delta(x) = f(0)\delta(x)\\ &\text{sowie } 1 + R(k) = T(k) \qquad \text{für } x = 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}=&ik\Big(e^{ikx} - R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x)\underline{-T(k)e^{ikx}\delta(x)}\\ &+ ikT(k)e^{ikx}\Theta(x)\underline{+T(k)e^{ikx}\delta(x)}\end{aligned}$$

$$\psi_k'(x) = ik\Big(e^{ikx} - R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) + ikT(k)e^{ikx}\Theta(x)\,, \tag{C.1}$$

um dann die zweite Ableitung für dieses Eigenwertproblem zu berechnen:

$$\psi_k'(x) = ik\Big(e^{ikx} - R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) + ikT(k)e^{ikx}\Theta(x)$$

$$\begin{aligned}\psi_k''(x) =& - k^2\Big(e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) - ik\Big(e^{ikx} - R(k)e^{-ikx}\Big)\delta(x)\\ &- k^2T(k)e^{ikx}\Theta(x) + ikT(k)e^{ikx}\delta(x)\\ &\text{mit } f(x)\delta(x) = f(0)\delta(x)\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -k^2\Big(e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x)\underline{-ik\Big(1 - R(k)\Big)}\delta(x) \\
&\quad - k^2T(k)e^{ikx}\Theta(x) + ikT(k)\delta(x)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= -k^2\Big(e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x)\underline{+ik\Big(R(k) + 1\Big)}\delta(x) \\
&\quad - k^2T(k)e^{ikx}\Theta(x) + ikT(k)\delta(x) \\
&\qquad \text{mit } R(k) = T(k) - 1
\end{aligned}
$$

$$
= -k^2\Big(e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) - k^2T(k)e^{ikx}\Theta(x) + 2ik\Big(T(k) - 1\Big)\delta(x)
$$

$$
= -k^2\left[\Big(e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) + T(k)e^{ikx}\Theta(x)\right] + 2ik\Big(T(k) - 1\Big)\delta(x)
$$

$$
\psi_k''(x) = -k^2\psi_k(x) + 2ik\Big(T(k) - 1\Big)\delta(x)\,. \tag{C.2}
$$

Im Folgenden wird die Lösung des Eigenwertproblems für die Wechselwirkung eines freien Teilchens mit einem Dirac-Potential ausgerechnet:

$$
\begin{aligned}
E\psi_k(x) &= H\psi_k(x) \\
&\qquad \text{mit } H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \lambda\delta(x) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_k(x) + \lambda\delta(x)\psi_k(x) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\psi_k\text{"}(x) + \lambda\delta(x)\psi_k(0) \\
&\qquad \text{mit (4.2)} \\
&= -\frac{\hbar^2k^2}{2m}\psi_k(x) - i\frac{\hbar^2k}{m}\Big(T(k) - 1\Big)\delta(x) + \lambda\delta(x)\psi_k(0) \\
&\qquad \text{mit der Energie des Teilchens } E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}
\end{aligned}
$$

$$E\psi_k(x) = E\psi_k(x) \underbrace{-i\frac{\hbar^2 k}{m}\Big(T(k)-1\Big)\delta(x) + \lambda\delta(x)\psi_k(0)}_{=0 \quad \text{Damit die Gleichung erfüllt ist.}} . \tag{C.3}$$

Der geschweifte Term in (C.3) muss nach der Transmissionsamplitude aufgelöst werden, bevor man die Reflexionsamplitude bestimmen kann. Dazu muss man sich der Anstückelungsbedingung $\psi_k(0) = T(k)$ bedienen. Damit ergibt sich die folgende Rechnung

$$\begin{aligned}
-i\frac{\hbar^2 k}{m}\Big(T(k)-1\Big)\delta(x) + \lambda\delta(x)\psi_k(0) &= 0 \\
-i\frac{\hbar^2 k}{m}\Big(T(k)-1\Big) + \lambda\psi_k(0) &= 0 \\
-i\frac{\hbar^2 k}{m}\Big(T(k)-1\Big) + \lambda T(k) &= 0 \\
T(k)\left(i\frac{\hbar^2 k}{m} - \lambda\right) &= i\frac{\hbar^2 k}{m} \\
T(k) = \frac{i\frac{\hbar^2 k}{m}}{i\frac{\hbar^2 k}{m} - \lambda} &= \frac{1}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}} .
\end{aligned} \tag{C.4}$$

Mit der ersten Bedingung aus (C.4) ergibt sich für die Reflexionsamplitude

$$R(k) = -\frac{i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}} . \tag{C.5}$$

Im Folgenden wird durch Bestimmung der Betragsquadrate der Wahrscheinlichkeitsamplituden bei der Wechselwirkung mit einem Dirac-Potential gezeigt

$$\begin{aligned}
|T(k)|^2 &= T(k)\cdot T^*(k) = \frac{1}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}\frac{1}{1 - i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}} = \frac{1}{1 + \left(\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}\right)^2} \\
|R(k)|^2 &= R(k)\cdot R^*(k) = -\frac{i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}{1 + i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}\cdot\frac{i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}}{1 - i\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}} = \frac{\left(\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}\right)^2}{1 + \left(\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}\right)^2} \\
1 &= |T(k)|^2 + |R(k)^2| = \frac{1}{1 + \left(\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}\right)^2} + \frac{\left(\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}\right)^2}{1 + \left(\frac{m\lambda}{\hbar^2 k}\right)^2} = 1 ,
\end{aligned} \tag{C.6}$$

dass die Summe der Quadrate eins ist. Es muss sich der Wert eins ergeben, da das Teilchen an dem Dirac-Potential entweder reflektiert oder durchgelassen wird.

D Anhang - Wechselwirkung mit zwei Dirac-Potentialen

Die Berechnung der Amplituden R und T werden in diesem Abschnitt unter Anwendung konventionieller Grundprinzipien der Quantentheorie ausführlich vorgestellt. Als erster Schritt wird wieder die erste Ableitung der Funktion $\psi_k(x)$ für die Wechselwirkung mit zwei Dirac-Potentialen bestimmt:

$$
\begin{aligned}
\psi_k(x) =& \Big(e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) \\
&+ \Big(A(k)e^{ikx} + B(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(x)\Theta(a-x) \\
&+ T(k)e^{ikx}\Theta(x-a) \\
&\qquad \text{mit Produktregel und } f(x)\delta(x) = f(0)\delta(x) \\
\psi_k'(x) =& ik\Big(e^{ikx} - R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) - \Big(1 + R(k)\Big)\delta(x) \\
&+ ik\Big(A(k)e^{ikx} - B(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(x)\Theta(a-x) \\
&+ \Big(A(k) + B(k)\Big)\delta(x)\Theta(a-x) \\
&- \Big(A(k)e^{ika} - B(k)e^{-ika}\Big)\Theta(x)\delta(a-x) \\
&+ ikT(k)e^{ikx}\Theta(x-a) + T(k)e^{ika}\delta(x-a) \\
&\qquad \text{mit } \delta(x)\Theta(x-a) = \delta(x) \text{ und } \Theta(x)\delta(a-x) = \delta(a-x) \\
\psi_k'(x) =& ik\Big(e^{ikx} - R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) \underline{- \Big(1 + R(k)\Big)\delta(x)} \\
&+ ik\Big(A(k)e^{ikx} - B(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(x)\Theta(a-x) \\
&\underline{+ \Big(A(k) + B(k)\Big)\delta(x)} \underline{\underline{- T(k)e^{ika}\delta(a-x)}} \\
&+ ikT(k)e^{ikx}\Theta(x-a) \underline{\underline{+ T(k)e^{ika}\delta(x-a)}} \\
\psi_k'(x) =& ik\Big(e^{ikx} - R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) \\
&+ ik\Big(A(k)e^{ikx} - B(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(x)\Theta(a-x) \\
&+ ikT(k)e^{ikx}\Theta(x-a)\,. \qquad \text{(D.1)}
\end{aligned}
$$

Dabei werden Bedingungen für Anstückelung $1 + R(k) = A(k) + B(k)$ und $T(k)e^{ika}\delta(x-a) = T(k)e^{ika}\delta(a-x)$ verwendet, um die Ableitung weiter zu

vereinfachen, bevor die zweite Ableitung der Funktion $\psi_k(x)$ für die Wechselwirkung mit zwei Dirac-Potentialen bestimmt wird. Die zweite Ableitung der Funktion $\psi_k(x)$ berechnet sich wie folgt

$$\begin{aligned}
\psi_k''(x) =& -k^2\Big(e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) - ik\Big(1 - R(k)\Big)\delta(x) \\
& - k^2\Big(A(k)e^{ikx} + B(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(x)\Theta(a-x) \\
& + ik\Big(A(k)e^{ikx} - B(k)e^{-ikx}\Big)\delta(x)\Theta(a-x) \\
& - ik\Big(A(k)e^{ikx} - B(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(x)\delta(a-x) \\
& - k^2T(k)e^{ikx}\Theta(x-a) + ikT(k)e^{ika}\delta(x-a) \\
& \quad \text{mit } \delta(x)\Theta(a-x) = \delta(x) \text{ und } \Theta(x)\delta(a-x) = \delta(a-x) \\
& \quad \text{und } f(x)\delta(a-x) = f(a)\delta(a-x)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_k''(x) =& -k^2\Big(e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) \underline{+ik\Big(R(k) - 1\Big)\delta(x)} \\
& - k^2\Big(A(k)e^{ikx} + B(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(x)\Theta(a-x) \\
& \underline{+ik\Big(A(k) - B(k)\Big)\delta(x)} \\
& \underline{\underline{+ik\Big(B(k)e^{-ika} - A(k)e^{ika}\Big)\delta(a-x)}} \\
& - k^2T(k)e^{ikx}\Theta(x-a) \underline{\underline{+ikT(k)e^{ika}\delta(x-a)}} \\
& \quad \text{mit den Übergangsbedingungen aus (3.20)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_k''(x) =& -k^2\Big(e^{ikx} + R(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(-x) \\
& - k^2\Big(A(k)e^{ikx} + B(k)e^{-ikx}\Big)\Theta(x)\Theta(a-x) \\
& - k^2T(k)e^{ikx}\Theta(x-a) \\
& + i2k\Big(A(k) - 1\Big)\delta(x) + i2kB(k)e^{-ika}\delta(x-a)
\end{aligned}$$

$$\psi_k''(x) = -k^2\psi_k(x) + i2k\Big(A(k) - 1\Big)\delta(x) + i2kB(k)e^{-ika}\delta(x-a)\,. \qquad \text{(D.2)}$$

E Anhang - Wechselwirkung mit einer Potentialbarriere

Wie schon bei den Wechselwirkungen mit einem und zwei Dirac-Potentialen wird auch die Berechnung der Amplituden R und T bei der Wechselwirkung mit einer Potentialbarriere nach konventionellen Grundprinzipien ausführlich dargestellt. Stetigkeitsbedingungen der Wellenfunktion für die Wechselwirkung mit einer Potentialbarriere lauten im Fall, dass für das Potential $E > V_0$ gilt, wie folgt

$$\begin{aligned} 1 + R &= B + C \\ ik(1 - R) &= iq(B - C) \\ Be^{iqa} + Ce^{-iqa} &= Te^{ika} \\ iq(Be^{iqa} - Ce^{-iqa}) &= ikTe^{ika} \end{aligned} \tag{E.1}$$

und nach Auflösen der Klammern ergibt sich

$$\begin{aligned} 1 + R &= B + C \\ k - kR &= qB - qC \\ Be^{iqa} + Ce^{-iqa} &= Te^{ika} \\ qBe^{iqa} - qCe^{-iqa} &= kTe^{ika}\,. \end{aligned} \tag{E.2}$$

Durch Einsetzen des Koeffizienten R in Stetigkeitsbedinung zwei erhält man nach Auflösen

$$\begin{aligned} k - kB - kC - k &= qB - qC \\ 2k - kB - kC &= qB - qC \\ 2k - kB - qB &= kC - qC \\ C &= \frac{2k - kB - qB}{k - q} \end{aligned} \tag{E.3}$$

eine Gleichung für den Koeffizienten B. Die Stetigkeitsbedinung vier wird nach Substitution des Koeffizienten T aus der Stetigkeitsbedingung drei

$$\begin{aligned} qBe^{iqa} - qCe^{-iqa} =& kBe^{iqa} + kCe^{-iqa} \\ Ce^{-iqa} =& \frac{qBe^{iqa} - kBe^{iqa}}{k+q} \\ Ce^{-iqa} =& \frac{qBe^{iqa} - kBe^{iqa}}{k+q} \\ C =& \frac{qBe^{i2qa} - kBe^{i2qa}}{k+q} \end{aligned} \tag{E.4}$$

auch nach dem Koeffizienten C aufgelöst. Nun kann man den Koeffizienten B durch Gleichsetzung bestimmen:

$$\begin{aligned} C =& C \\ \frac{2k - kB - qB}{k-q} =& \frac{qBe^{i2qa} - kBe^{i2qa}}{k+q} \\ (2k - kB - qB)(k+q) =& (qBe^{i2qa} - kBe^{i2qa})(k-q) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2k^2 - k^2B - kqB + 2kq - kqB - q^2B & \\ =& kqBe^{i2qa} - k^2Be^{i2qa} - q^2Be^{i2qa} + kqBe^{i2qa} \end{aligned}$$

$$2k(k+q) = k^2B + 2kqB + q^2 + 2kqBe^{i2qa} - k^2Be^{i2qa} - q^2Be^{i2qa}$$

$$B = \frac{2k(k+q)}{k^2 + 2kq + q^2 + 2kqe^{i2qa} - k^2e^{i2qa} - q^2e^{i2qa}} . \tag{E.5}$$

Als nächsten Koeffizienten kann man nun C berechnen:

$$\begin{aligned} C =& \frac{qe^{i2qa} - ke^{i2qa}}{k+q} B \\ C =& \frac{qe^{i2qa} - ke^{i2qa}}{k+q} \frac{2k(k+q)}{k^2 + 2kq + q^2 + 2kqe^{i2qa} - k^2e^{i2qa} - q^2e^{i2qa}} \\ C =& \frac{\left(qe^{i2qa} - ke^{i2qa}\right)2k}{k^2 + 2kq + q^2 + 2kqe^{i2qa} - k^2e^{i2qa} - q^2e^{i2qa}} . \end{aligned} \tag{E.6}$$

Die beiden Koeffizienten sind nicht für die Deutung der Wechselwirkung eines Teilchens an einer Potentialbarriere wichtig, wenn die Detektoren weit weg von der Wechselwirkung angeordnet sind. Mit Hilfe der Koeffizienten B und C wird nun als erstes die Reflexionsamplitude R berechnet:

$$\begin{aligned}
R =& B + C - 1 \\
R =& \frac{2k^2 + 2kq + 2kqe^{i2qa} - 2k^2e^{i2qa} - k^2 - 2kq - q^2 - 2kqe^{i2qa} + k^2e^{i2qa} + q^2e^{i2qa}}{k^2 + 2kq + q^2 + 2kqe^{i2qa} - k^2e^{i2qa} - q^2e^{i2qa}} \\
R =& \frac{k^2 - k^2e^{i2qa} - q^2 + q^2e^{i2qa}}{k^2 + 2kq + q^2 + 2kqe^{i2qa} - k^2e^{i2qa} - q^2e^{i2qa}} \\
R =& \frac{k^2(1 - e^{i2qa}) - q^2(1 - e^{i2qa})}{k^2 + 2kq + q^2 + 2kqe^{i2qa} - k^2e^{i2qa} - q^2e^{i2qa}} \\
R =& \frac{(k^2 - q^2)(1 - e^{i2qa})}{k^2 + 2kq + q^2 + 2kqe^{i2qa} - k^2e^{i2qa} - q^2e^{i2qa}} \,. \qquad \text{(E.7)}
\end{aligned}$$

Auf ähnliche Weise wird nun der Transmissionskoeffizient T bestimmt:

$$\begin{aligned}
Te^{ika} =& Be^{iqa} + Ce^{-iqa} \\
Te^{ika} =& \frac{2k^2e^{iqa} + 2kqe^{iqa} + 2kqe^{iqa} - 2k^2e^{iqa}}{k^2 + 2kq + q^2 + 2kqe^{i2qa} - k^2e^{i2qa} - q^2e^{i2qa}} \\
Te^{ika} =& \frac{2kqe^{iqa} + 2kqe^{iqa}}{k^2 + 2kq + q^2 + 2kqe^{i2qa} - k^2e^{i2qa} - q^2e^{i2qa}} \\
Te^{ika} =& \frac{4kqe^{iqa}}{k^2 + 2kq + q^2 + 2kqe^{i2qa} - k^2e^{i2qa} - q^2e^{i2qa}} \\
T =& \frac{4kqe^{iqa}e^{-ika}}{k^2 + 2kq + q^2 + 2kqe^{i2qa} - k^2e^{i2qa} - q^2e^{i2qa}} \,. \qquad \text{(E.8)}
\end{aligned}$$

Für eine weitere Betrachtung ist es günstiger, die Transmissions- und Reflexionsamplituden umzuformen:

$$\begin{aligned}
R =& \frac{(k^2 - q^2)(1 - e^{i2qa})}{k^2 + q^2 - k^2e^{i2qa} - q^2e^{i2qa} + 2kq + 2kqe^{i2qa}} \\
R =& \frac{-kqe^{iqa}\left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)(e^{iqa} - e^{-iqa})}{-kqe^{iqa}\left[-\frac{k}{q}e^{-iqa} - \frac{q}{k}e^{-iqa} + \frac{k}{q}e^{iqa} + \frac{q}{k}e^{iqa} - 2e^{-iqa} - 2e^{iqa}\right]}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
R =& \frac{\left(\frac{k}{q}-\frac{q}{k}\right)(e^{iqa}-e^{-iqa})}{\left(\frac{k}{q}+\frac{q}{k}\right)(e^{iqa}-e^{-iqa})-2\left(e^{-iqa}+e^{iqa}\right)} \\
R =& \frac{\left(\frac{k}{q}-\frac{q}{k}\right)2i\sin qa}{\left(\frac{k}{q}+\frac{q}{k}\right)2i\sin qa-4\cos qa} \\
R =& \frac{\left(\frac{k}{q}-\frac{q}{k}\right)i\sin qa}{\left(\frac{k}{q}+\frac{q}{k}\right)i\sin qa-2\cos qa} \qquad \text{(E.9)} \\
T =& \frac{4kqe^{iqa}e^{-ika}}{k^2+q^2-k^2e^{i2qa}-q^2e^{i2qa}+2kq+2kqe^{i2qa}} \\
T =& \frac{4kqe^{iqa}e^{-ika}}{-kqe^{iqa}\left[-\frac{k}{q}e^{-iqa}-\frac{q}{k}e^{-iqa}+\frac{k}{q}e^{iqa}+\frac{q}{k}e^{iqa}-2e^{-iqa}-2e^{iqa}\right]} \\
T =& -\frac{4e^{-ika}}{\left(\frac{k}{q}+\frac{q}{k}\right)(e^{iqa}-e^{-iqa})-2\left(e^{-iqa}+e^{iqa}\right)} \\
T =& -\frac{4e^{-ika}}{\left(\frac{k}{q}+\frac{q}{k}\right)2i\sin qa-4\cos qa} \\
T =& -\frac{2e^{-ika}}{\left(\frac{k}{q}+\frac{q}{k}\right)i\sin qa-2\cos qa}\,. \qquad \text{(E.10)}
\end{aligned}
$$

Zum Abschluss erfolgt ein detailierter Beweis für das Verhalten eines Teilchens

$$
\begin{aligned}
1 =& |T|^2+|R|^2 \\
1 =& |T\,T^*|+|R^*R| \\
1 =& \frac{\left|(-2e^{-ika})(-2e^{ika})\right|+\left|\left[\left(\frac{k}{q}-\frac{q}{k}\right)i\sin qa\right]\left[-\left(\frac{k}{q}-\frac{q}{k}\right)i\sin qa\right]\right|}{\left[\left(\frac{k}{q}+\frac{q}{k}\right)i\sin qa-2\cos qa\right]\left[-\left(\frac{k}{q}+\frac{q}{k}\right)i\sin qa-2\cos qa\right]} \\
1 =& \frac{4+\left(\frac{k}{q}-\frac{q}{k}\right)^2\sin^2 qa}{\left(\frac{k}{q}+\frac{q}{k}\right)^2\sin^2 qa+4\cos^2 qa} \\
& \text{mit } 1=\cos^2 qa+\sin^2 qa \text{ ergibt sich}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
1 =& \frac{4 + \left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)^2 \sin^2 qa}{\left(\frac{k}{q} + \frac{q}{k}\right)^2 \sin^2 qa + 4 - 4\sin^2 qa} \\
1 =& \frac{4 + \left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)^2 \sin^2 qa}{4 + \left(-4 + \frac{k^2}{q^2} + 2 + \frac{q^2}{k^2}\right) \sin^2 qa} \\
1 =& \frac{4 + \left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)^2 \sin^2 qa}{4 + \left(\frac{k^2}{q^2} - 2 + \frac{q^2}{k^2}\right) \sin^2 qa} \\
1 =& \frac{4 + \left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)^2 \sin^2 qa}{4 + \left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)^2 \sin^2 qa}\,,
\end{aligned}
\tag{E.11}
$$

d.h. die Wahrscheinlichkeit ein reflektiertes oder transmittiertes Teilchen zu finden ist genau eins.

F Anhang - Ausbreitungskern eines freien Teilchens

Die Amplitude für ein transmittiertes Teilchen ohne Wechselwirkung berechnet sich wie folgt

$$K_0(x_f, x_i, t_f, t_i) = \lim_{\tau \to 0} \int \int ... \int \exp\left[\frac{im}{2\pi\hbar\tau} \sum_{i=1}^{N} (x_i - x_{i-1})^2\right] dx_1 ... dx_{N-1} \left(\frac{2\pi i\hbar\tau}{m}\right)^{-N/2}$$
$$= \left[\frac{2\pi i\hbar(t_f - t_i)}{m}\right]^{-1/2} \exp \frac{im(x_f - x_i)^2}{2\hbar(t_f - t_i)} \qquad \text{(F.1)}$$

und wird bei allen Betrachtungen zu den Pfadintegralen nach Feynman verwendet [Feynman 1965].

G Anhang - Reihenentwicklung für zwei Dirac-Potentiale

Zum Vergleich der Amplituden R und T aus der konventionellen Berechung und der Berechnung nach Feynman werden die Ergebnisse der konventionellen Rechnung in eine Reihe entwickelt. Die folgenden Amplituden wurden im Kapitel (3.2) berechnet

$$\begin{aligned} R =& -\frac{i\left(\frac{\lambda_1 m}{\hbar^2 k}+\frac{\lambda_2 m}{\hbar^2 k}e^{i2ka}\right)+\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}\left(e^{i2ka}-1\right)}{1+i\left(\frac{\lambda_1 m}{\hbar^2 k}+\frac{\lambda_2 m}{\hbar^2 k}\right)+\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}\left(e^{i2ka}-1\right)} \\ T =& \frac{1}{1+i\left(\frac{\lambda_1 m}{\hbar^2 k}+\frac{\lambda_2 m}{\hbar^2 k}\right)+\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}\left(e^{i2ka}-1\right)} \end{aligned} \tag{G.1}$$

und werden in eine Reihe entwickelt. Dabei kann man folgende allgemeine Reihenentwicklung auf beide Amplituden anwenden:

$$\frac{1}{1+q} = 1-q+q^2-O(q^3), \quad q = i\left(\frac{\lambda_1 m}{\hbar^2 k}+\frac{\lambda_2 m}{\hbar^2 k}\right)+\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}\left(e^{i2ka}-1\right). \tag{G.2}$$

Damit ergibt sich für die Transmissionsamplitude an zwei räumlich getrennten, unterschiedlich starken Dirac-Potentialen folgende Reihenentwicklung bis zur dritten Ordnung,

$$T = 1-i\left(\frac{\lambda_1 m}{\hbar^2 k}+\frac{\lambda_2 m}{\hbar^2 k}\right)-\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}\left(e^{i2ka}-1\right)$$

$$
\begin{aligned}
&+\left[i\left(\frac{\lambda_1 m}{\hbar^2 k}+\frac{\lambda_2 m}{\hbar^2 k}\right)+\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}\left(e^{i2ka}-1\right)\right]^2+O(\lambda_1^3,\lambda_2^3)\\
=&1-\frac{i\lambda_1 m}{\hbar^2 k}-\frac{i\lambda_2 m}{\hbar^2 k}-\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}e^{i2ka}+\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}\\
&-\frac{\lambda_1^2 m^2}{\hbar^4 k^2}-\frac{2\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}-\frac{\lambda_2^2 m^2}{\hbar^4 k^2}+O(\lambda_1^3,\lambda_2^3)\\
=&1-\frac{i\lambda_1 m}{\hbar^2 k}-\frac{i\lambda_2 m}{\hbar^2 k}-\frac{\lambda_1^2 m^2}{\hbar^4 k^2}-\frac{\lambda_2^2 m^2}{\hbar^4 k^2}-\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}-\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}e^{i2ka}+O(\lambda_1^3,\lambda_2^3)
\end{aligned}
\tag{G.3}
$$

und für die Reflexionsamplitude

$$
\begin{aligned}
R=&\Big(-\frac{i\lambda_1 m}{\hbar^2 k}-\frac{i\lambda_2 m}{\hbar^2 k}e^{i2ka}-\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}e^{i2ka}+\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}\Big)T+O(\lambda_1^3,\lambda_2^3)\\
=&-\frac{i\lambda_1 m}{\hbar^2 k}-\frac{i\lambda_2 m}{\hbar^2 k}e^{i2ka}-\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}e^{i2ka}+\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}-\frac{\lambda_1^2 m^2}{\hbar^4 k^2}\\
&-\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}-\frac{\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}e^{2ika}\frac{\lambda_1^2 m^2}{\hbar^4 k^2}e^{2ika}+O(\lambda_1^3,\lambda_2^3)\\
=&-\frac{i\lambda_1 m}{\hbar^2 k}-\frac{i\lambda_2 m}{\hbar^2 k}e^{2ika}-\frac{\lambda_1^2 m^2}{\hbar^4 k^2}-\frac{\lambda_2^2 m^2}{\hbar^4 k^2}e^{i2ka}-\frac{2\lambda_1\lambda_2 m^2}{\hbar^4 k^2}e^{i2ka}+O(\lambda_1^3,\lambda_2^3)\,.
\end{aligned}
\tag{G.4}
$$

H Anhang - Berechnung der Potentialbarriere nach Feynman

Für die Bestimmung des Pfadintegrals [Feynman 1965] für die Wechselwirkung eines Teilchens mit einer Potentialbarriere (4.74) wird die Amplitude für ein transmittiertes Teilchen ohne Wechselwirkung (Anhang F)

$$K_{(0)} = \left[\frac{2\pi i\hbar(t_f - t_i)}{m}\right]^{-1/2} \exp\frac{im(x_f - x_i)^2}{2\hbar(t_f - t_i)} \tag{H.1}$$

benötigt. Dann wird die Amplitude für ein transmittiertes und reflektiertes Teilchen mit einer Wechselwirkung

$$\begin{aligned}
K^{(1)} &= -\frac{imV}{\hbar^2 k}\int_0^a dx_c \left[\underbrace{e^{ik(x_f-x_c)}e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{transmittiert}} + \underbrace{e^{-ik(x_f-x_c)}e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{reflektiert}}\right] \\
&= -\frac{imV}{\hbar^2 k}\int_0^a dx_c \left[e^{ik(x_f-x_c)}e^{ik(x_c-x_i)} + e^{ik(x_c-x_f)}e^{ik(x_c-x_i)}\right] \\
&= -\frac{imV}{\hbar^2 k}\int_0^a dx_c \left[e^{ik(x_f-x_i)} + e^{ik(-x_f-x_i)}e^{2ikx_c}\right] \\
&= -\frac{imV}{\hbar^2 k}\left[e^{ik(x_f-x_i)}x_c\Big|_{x_c=0}^{x_c=a} + e^{ik(-x_f-x_i)}\frac{1}{2ik}e^{2ikx_c}\Big|_{x_c=0}^{x_c=a}\right] \\
&= -\frac{imV}{\hbar^2 k}\left[e^{ik(x_f-x_i)}a + e^{ik(-x_f-x_i)}\frac{1}{2ik}\left(e^{2ika}-1\right)\right] \\
&= -\frac{imaV}{\hbar^2 k}e^{ik(x_f-x_i)} - \frac{imV}{\hbar^2 k^2}e^{ik(-x_f-x_i)}e^{ika}\frac{1}{2i}\left(e^{ika}-e^{-ika}\right) \\
&= -\frac{imaV}{\hbar^2 k}e^{ik(x_f-x_i)} - \frac{imV}{\hbar^2 k^2}e^{ik(-x_f-x_i)}e^{ika}\frac{1}{2i}2i\sin ka \\
&= \underbrace{-\frac{imaV}{\hbar^2 k}}_{\text{Transmission}-}\ e^{ik(x_f-x_i)}\ \underbrace{-\frac{imV}{\hbar^2 k^2}e^{ika}\sin ka}_{\text{Reflexionsamplitude}}\ e^{ik(-x_f-x_i)}
\end{aligned} \tag{H.2}$$

berechnet. Als nächstes erfolgt die Berechnung des Ausbreitungskerns für zwei Wechselwirkungen, der sich aus den folgenden Integralen zusammensetzt

$$
\begin{aligned}
K^{(2)} = -\frac{m^2V^2}{\hbar^4k^2}\Bigg[& \underbrace{\int_0^a dx_c \int_{x_c}^a dx_d e^{ik(x_f-x_d)}e^{ik(x_d-x_c)}e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Transmission mit } x_c<x_d} \\
& + \underbrace{\int_a^a dx_c \int_0^{x_c} dx_d e^{ik(x_f-x_d)}e^{-ik(x_d-x_c)}e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Transmission mit } x_c>x_d} \\
& + \underbrace{\int_0^a dx_c \int_{x_c}^a dx_d e^{-ik(x_f-x_d)}e^{ik(x_d-x_c)}e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Reflexion mit } x_c<x_d} \\
& + \underbrace{\int_0^a dx_c \int_0^{x_c} dx_d e^{-ik(x_f-x_d)}e^{-ik(x_d-x_c)}e^{ik(x_c-x_i)}}_{\text{Reflexion mit } x_c>x_d}
\end{aligned}
$$

und dann weiter berechnet wird

$$
\begin{aligned}
= -\frac{m^2V^2}{\hbar^4k^2}\Bigg[& \int_0^a dx_c \int_{x_c}^a dx_d e^{ik(x_f-x_i)} \\
& + \int_0^a dx_c \int_0^{x_c} dx_d e^{ik(x_f-x_i)}e^{-2ikx_d}e^{2ikx_c} \\
& + \int_0^a dx_c \int_{x_c}^a dx_d e^{ik(-x_f-x_i)}e^{2ikx_d} \\
& + \int_0^a dx_c \int_0^{x_c} dx_d e^{ik(-x_f-x_i)}e^{2ikx_c}\Bigg]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
=-\frac{m^2V^2}{\hbar^4k^2}\Bigg[&\int_0^a dx_c e^{ik(x_f-x_i)}x_d\Big|_{x_d=x_c}^{x_d=a}\\
&+\int_0^a dx_c e^{ik(x_f-x_i)}e^{2ikx_c}\frac{1}{-2ik}e^{-2ikx_d}\Big|_{x_d=0}^{x_d=x_c}\\
&+\int_0^a dx_c e^{ik(-x_f-x_i)}\frac{1}{2ik}e^{2ikx_d}\Big|_{x_d=x_c}^{x_d=a}\\
&+\int_0^a dx_c e^{ik(-x_f-x_i)}e^{2ikx_c}x_d\Big|_{x_d=0}^{x_d=x_c}\Bigg]\\
=-\frac{m^2V^2}{\hbar^4k^2}\Bigg[&\int_0^a dx_c e^{ik(x_f-x_i)}(a-x_c)+\\
&+\int_0^a dx_c e^{ik(x_f-x_i)}\frac{1}{2ik}\Big(e^{2ikx_c}-1\Big)\\
&+\int_0^a dx_c e^{ik(-x_f-x_i)}\frac{1}{2ik}\Big(e^{2ika}-e^{2ikx_c}\Big)\\
&+\int_0^a dx_c e^{ik(-x_f-x_i)}e^{2ikx_c}x_c\Bigg]\\
=-\frac{m^2V^2}{\hbar^4k^2}\Bigg[&e^{ik(x_f-x_i)}\Big(a\,x_c-\frac{x_c^2}{2}\Big)\Big|_{x_c=0}^{x_c=a}\\
&+e^{ik(x_f-x_i)}\frac{1}{2ik}\Big(\frac{1}{2ik}e^{2ikx_c}-x_c\Big)\Big|_{x_c=0}^{x_c=a}\\
&+e^{ik(-x_f-x_i)}\frac{1}{2ik}\Big(e^{2ika}x_c-\frac{1}{2ik}e^{2ikx_c}\Big)\Big|_{x_c=0}^{x_c=a}\\
&+e^{ik(-x_f-x_i)}\Big(-\frac{ia}{2k}e^{2ika}-\int_0^a dx_c\frac{1}{2ik}e^{2ikx_c}\Big)\Bigg]\\
=-\frac{m^2V^2}{\hbar^4k^2}\Bigg[&e^{ik(x_f-x_i)}\frac{a^2}{2}\\
&+e^{ik(x_f-x_i)}\Big(-\frac{1}{4k^2}e^{2ika}-\frac{ia}{2k}+\frac{1}{4k^2}\Big)\\
&+e^{ik(-x_f-x_i)}\Big(-\frac{ia}{2k}e^{2ika}+\frac{1}{4k^2}e^{2ika}-\frac{1}{4k^2}\Big)\\
&+e^{ik(-x_f-x_i)}\Big(-\frac{ia}{2k}e^{2ika}+\frac{1}{4k^2}e^{2ika}-\frac{1}{4k^2}\Big)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
= & -\frac{a^2 m^2 V^2}{2\hbar^4 k^2} e^{ik(x_f - x_i)} \quad \text{Transmission zwei WW eine Stelle} \\
& -\frac{iam^2 V^3}{2\hbar^4 k^3} e^{ik(x_f - x_i)} \quad \text{Transmission zwei WW zwei Stellen } \mathrm{x_c} < \mathrm{x_d} \\
& +\frac{im^2 V^2}{2\hbar^4 k^4} e^{ika} \sin ka \, e^{ik(x_f - x_i)} \quad \text{Transmission zwei WW zwei Stellen } \mathrm{x_c} > \mathrm{x_d} \\
& +\frac{iam^2 V^3}{\hbar^4 k^3} e^{2ika} e^{ik(-x_f - x_i)} \quad \text{Reflexion zwei WW zwei Stellen} \\
& -\frac{im^2 V^2}{\hbar^4 k^4} e^{ika} \sin ka \, e^{ik(-x_f - x_i)} \quad \text{Reflexion zwei WW eine Stelle.}
\end{aligned} \tag{H.3}
$$

I Anhang - Reihenentwicklung für die Potentialbarriere

Im folgenden Abschnitt werden die Amplituden R und T aus der Berechnung nach konventioniellen Grundprinzipien der Quantentheorie für den Vergleich mit der Berechnung nach Feynman in eine Reihe entwickelt. Die Amplituden für die Wechselwirkung eines Teilchens mit einer Potentialbarriere wurden in Kapitel (3.3)

$$R = \frac{i\left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)\sin qa}{i\left(\frac{k}{q} + \frac{q}{k}\right)\sin qa - 2\cos qa} \tag{I.1}$$

berechnet. Dabei bedeuten die enthaltenen Koeffizienten folgendes

$$\begin{aligned} a =& \text{Breite der Potentialbarriere} \\ k =& \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ q =& \sqrt{k^2 - \frac{2mV}{\hbar^2}}\,. \end{aligned} \tag{I.2}$$

Damit kann man die Reflexionsamplitude R wie auch die Transmissionamplitude T folgendermaßen notieren

$$\begin{aligned} R =& \frac{i\left(\frac{1}{\sqrt{1-\frac{2mV}{\hbar^2k^2}}} - \sqrt{1-\frac{2mV}{\hbar^2k^2}}\right)\sin\left(ka\sqrt{1-\frac{2mV}{\hbar^2k^2}}\right)}{i\left(\frac{1}{\sqrt{1-\frac{2mV}{\hbar^2k^2}}} + \sqrt{1-\frac{2mV}{\hbar^2k^2}}\right)\sin\left(ka\sqrt{1-\frac{2mV}{\hbar^2k^2}}\right) - 2\cos\left(ka\sqrt{1-\frac{2mV}{\hbar^2k^2}}\right)} \\ T =& \frac{-2e^{-ika}}{i\left(\frac{1}{\sqrt{1-\frac{2mV}{\hbar^2k^2}}} + \sqrt{1-\frac{2mV}{\hbar^2k^2}}\right)\sin\left(ka\sqrt{1-\frac{2mV}{\hbar^2k^2}}\right) - 2\cos\left(ka\sqrt{1-\frac{2mV}{\hbar^2k^2}}\right)} \end{aligned} \tag{I.3}$$

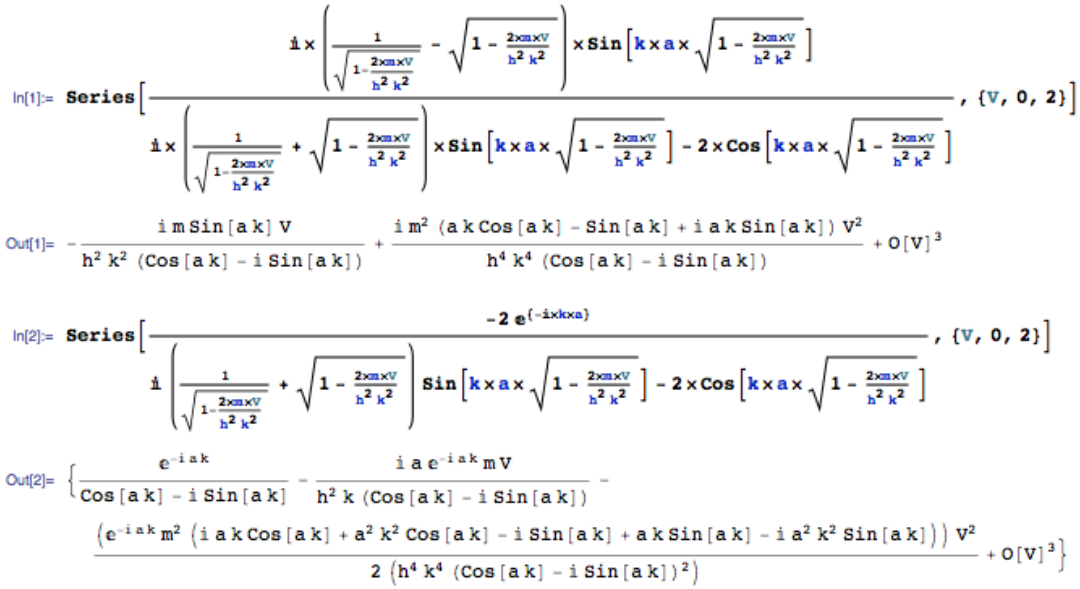


Abbildung I.1: Reihenentwicklung mit Mathematica

und kann diese bequem mit Mathematica (Abb. I.1) lösen. Die Amplituden für die Transmission T lautet in Reihenentwicklung bis zur zweiten Ordnung des Potentials V

$$\begin{aligned}
T =& 1 - \frac{ia\,mV}{\hbar^2 k} - \frac{a^2 m^2 V^2}{2\hbar^4 k^2} e^{ika}\cos ka + \frac{ia^2 m^2 V^2}{2\hbar^4 k^2} e^{ika}\sin ka \\
& - \frac{iam^2 V^2}{2\hbar^4 k^3} e^{ika}\cos ka - \frac{am^2 V^2}{2\hbar^4 k^3} e^{ika}\sin ka + \frac{im^2 V^2}{2\hbar^4 k^4} e^{ika}\sin ka \\
& + O(V^3) \\
=& 1 - \frac{ia\,mV}{\hbar^2 k} - \frac{a^2 m^2 V^2}{2\hbar^4 k^2} e^{ika}\Big(\cos ka - i\sin ka\Big) \\
& - \frac{iam^2 V^2}{2\hbar^4 k^3} e^{ika}\Big(\cos ka - i\sin ka\Big) + \frac{im^2 V^2}{2\hbar^4 k^4} e^{ika}\sin ka + O(V^3) \\
=& 1 - \frac{ia\,mV}{\hbar^2 k} - \frac{a^2 m^2 V^2}{2\hbar^4 k^2} - \frac{iam^2 V^2}{2\hbar^4 k^3} + \frac{im^2 V^2}{2\hbar^4 k^4} e^{ika}\sin ka + O(V^3)
\end{aligned} \tag{I.4}$$

und für die Reflexion R

$$\begin{aligned}
R = &- \frac{imV}{\hbar^2 k^2} e^{ika} \sin ka - \frac{im^2V^2}{\hbar^4 k^4} e^{ika} \sin ka \\
&+ \frac{ia\, m^2V^2}{\hbar^4 k^3} e^{ika} \cos ka - \frac{a\, m^2V^2}{\hbar^4 k^3} e^{ika} \sin ka + O(V^3) \\
= &- \frac{imV}{\hbar^2 k^2} e^{ika} \sin ka - \frac{im^2V^2}{\hbar^4 k^4} e^{ika} \sin ka \\
&+ \frac{ia\, m^2V^2}{\hbar^4 k^3} e^{ika} \Big(\cos ka + i \sin ka \Big) + O(V^3) \\
= &- \frac{imV}{\hbar^2 k^2} e^{ika} \sin ka - \frac{im^2V^2}{\hbar^4 k^4} e^{ika} \sin ka \\
&+ \frac{ia\, m^2V^2}{\hbar^4 k^3} e^{2ika} + O(V^3)\,. \qquad \text{(I.5)}
\end{aligned}$$

In den Lösungen der Transmissionsamplitude T und der Reflexionsamplitude R sind folgende Terme und deren Bedeutung

$$\begin{aligned}
T = &1 \quad \text{Transmission ohne Wechselwirkung} \\
&- \frac{iamV}{\hbar^2 k} \quad \text{Transmission mit einer Wechselwirkung} \\
&- \frac{iam^2V^2}{2\hbar^4 k^3} \quad \text{Transmission zwei WW zwei Stellen } x_c < x_d \\
&- \frac{a^2 m^2 V^2}{2\hbar^4 k^2} \quad \text{Transmission zwei Wechselwirkungen eine Stelle} \\
&+ e^{ika} \frac{im^2V^2}{2\hbar^4 k^4} \sin ka \quad \text{Transmission zwei WW zwei Stellen, } x_c > x_d \\
R = &- \frac{iamV}{\hbar^2 k} e^{ika} \sin ka \quad \text{Reflexion mit einer Wechselwirkung} \\
&- \frac{iam^2V^2}{\hbar^4 k^3} e^{2ika} \quad \text{Reflexion zwei WW zwei Stellen} \\
&- \frac{im^2V^2}{\hbar^4 k^3} e^{ika} \sin ka \quad \text{Reflexion zwei WW eine Stelle} \qquad \text{(I.6)}
\end{aligned}$$

enthalten.

J Anhang - Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Der folgende Abschnitt dient zur Einführung einiger Rechenregeln und Eigenschaften des Erzeugungs- $a^\dagger$ und Vernichtungsoperators a beim harmonischen Oszillator [Bertlmann 2008, Neufeld 2012]. Für den Vernichtungs- und Erzeugungsoperator gibt es folgende Zusammenhänge

$$
\begin{aligned}
a =& \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega x + ip) = \text{Vernichtungsoperator} \\
a^\dagger =& \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega x - ip) = \text{Erzeugungsoperator} \\
aa^\dagger =& \frac{1}{2m\omega\hbar}\Big((m\omega x)^2 + p^2 - im\omega xp + im\omega px\Big) \\
=& \frac{1}{2m\omega\hbar}\Big((m\omega x)^2 + p^2 - im\omega(xp - px)\Big) \\
=& \frac{1}{2m\omega\hbar}\Big((m\omega x)^2 + p^2 - im\omega[xp]\Big) \\
a^\dagger a =& \frac{1}{2m\omega\hbar}\Big((m\omega x)^2 + p^2 + im\omega xp - im\omega px\Big) \\
=& \frac{1}{2m\omega\hbar}\Big((m\omega x)^2 + p^2 + im\omega(xp - px)\Big) \\
=& \frac{1}{2m\omega\hbar}\Big((m\omega x)^2 + p^2 + im\omega[xp]\Big) \\
\Big[a, a^\dagger\Big] =& aa^\dagger - a^\dagger a = \frac{1}{2m\omega\hbar}\Big(-2im\omega \underbrace{[xp]}_{i\hbar}\Big) = -\frac{2i^2 m\omega\hbar}{2m\omega\hbar} = 1 \\
\Big[a^\dagger, a\Big] =& a^\dagger a - aa^\dagger = \frac{1}{2m\omega\hbar}\Big(2im\omega \underbrace{[xp]}_{i\hbar}\Big) = \frac{2i^2 m\omega\hbar}{2m\omega\hbar} = -1 \\
N^\dagger =& \Big(a^\dagger a\Big)^\dagger = (a)^\dagger (a^\dagger)^\dagger = a^\dagger a = N \\
& \text{damit ist } N \text{ ein hermitescher Operator}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\text{Anwendung der Regel}: [ab,c] &= a[b,c] + [a,c]b \\
[a,bc] &= [a,b]c + b[a,c] \\
\left[N,a^\dagger\right] &= [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger \underbrace{[a,a^\dagger]}_{1} + \underbrace{[a^\dagger,a^\dagger]}_{0} a = a^\dagger \\
\left[N,a\right] &= [a^\dagger a, a] = a^\dagger \underbrace{[a,a]}_{0} + \underbrace{[a^\dagger,a]}_{-1} a = -a\,,
\end{aligned}
\tag{J.1}
$$

die man in verschiedenen Betrachtungen der Quantentheorie einsetzen kann. Als nächstes wird die iterative Herleitung der Erzeugungsgleichung

$$
\begin{aligned}
|n\rangle &= = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |0\rangle \\
|n+1\rangle &= = \frac{1}{\sqrt{n+1}} a^\dagger |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger a^\dagger |n\rangle \\
|n+2\rangle &= = \frac{1}{\sqrt{n+2}} a^\dagger |n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+2}} \frac{1}{\sqrt{n+1}} \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger a^\dagger a^\dagger |0\rangle \\
|n\rangle &= = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle
\end{aligned}
\tag{J.2}
$$

als Anwendung des Erzeugungsoperators gezeigt. Im Weiteren werden Regeln für das Arbeiten mit den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$
\begin{aligned}
\langle 0|a^n (a^\dagger)^n|0\rangle &= \langle 0|a^{n-1} \underbrace{\left[a,(a^\dagger)^n\right]}_{n(a^\dagger)^{n-1}} |0\rangle \\
&= n\langle 0|a^{n-1}(a^\dagger)^{n-1}|0\rangle \\
&= n\langle 0|a^{n-2} \underbrace{\left[a,(a^\dagger)^{n-1}\right]}_{(n-1)(a^\dagger)^{n-2}} |0\rangle \\
&= n(n-1)\langle 0|a^{n-2}(a^\dagger)^{n-2}|0\rangle \\
&= n(n-1)\langle 0|a^{n-3} \underbrace{\left[a,(a^\dagger)^{n-2}\right]}_{(n-2)(a^\dagger)^{n-3}} |0\rangle \\
&= n(n-1)(n-2)\langle 0|a^{n-3}(a^\dagger)^{n-3}|0\rangle \\
&= n(n-1)(n-2)\langle 0| \underbrace{a^{n-n}}_{a^0=1} \underbrace{\left[a,(a^\dagger)^{n-n+1}\right]}_{(n-n+1)(a^\dagger)^{n-n}} |0\rangle \\
&= n(n-1)(n-2)...1\langle 0|0\rangle = n!\langle 0|0\rangle
\end{aligned}
\tag{J.3}
$$

vorgestellt. Damit erklärt sich auch die Normierung nach n-maligem Anwenden des Erzeugungsoperatores $a^\dagger$ in Gleichung (4.123). Dabei wurde folgender Zusammenhang zwischen Ableitung eines Operators und einem zugehörigen Kommutator

$$\text{wegen } [A, BC] = [A, B]C + B[A, c] \text{ und } [a, a^\dagger] = \mathbb{1}$$

$$\begin{aligned}
[a, (a^\dagger)^2] =& [a, a^\dagger a^\dagger] = [a, a^\dagger]a^\dagger + a^\dagger[a, a^\dagger] = a^\dagger + a^\dagger = 2a^\dagger \\
[a, (a^\dagger)^3] =& [a, a^\dagger a^\dagger a^\dagger] = [a, a^\dagger]a^\dagger a^\dagger + a^\dagger[a, a^\dagger]a^\dagger + a^\dagger a^\dagger[a, a^\dagger] \\
=& (a^\dagger)^2 + (a^\dagger)^2 + (a^\dagger)^2 = 3(a^\dagger)^2 \\
[a, (a^\dagger)^n] =& \underbrace{[a, a^\dagger](a^\dagger)^{n-1} + ... + (a^\dagger)^{n-1}[a, a^\dagger]}_{n-mal} = n(a^\dagger)^{n-1}
\end{aligned} \tag{J.4}$$

verwendet.

K Anhang - Lösung der Differentialgleichung für den Grundzustand

Die Lösung der Differentialgleichung für die Grundzustandswellenfunktion $\psi_0(x)$ erfolgt durch Separation der Variablen [Bertlmann 2008, Neufeld 2006/07]

$$\begin{aligned}
0 =& \left(\frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{d}{dx}\right)\psi_0 \\
0 =& \frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0 + \frac{d\psi_0}{dx} \\
-\frac{d\psi_0}{dx} =& \frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0 \\
-\frac{d\psi_0}{\psi_0} =& \frac{m\omega}{\hbar}x\,dx \\
-\int \frac{1}{\psi_0}d\psi_0 =& \int \frac{m\omega}{\hbar}x\,dx \\
\ln\psi_0 =& -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 - C \\
\psi_0 =& e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 - C} \\
\psi_0 =& e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\mathcal{N} \quad \text{mit } e^{-C} = \mathcal{N}\,.
\end{aligned} \tag{K.1}$$

Damit ist die Lösung für den Grundzustand eine Gaußsche Funktion, deren Konstante $\mathcal{N}$ durch die Normierung $\int |\psi_0|^2 = 1$

$$\begin{aligned}
\psi_0 =& e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\mathcal{N} \\
1 =& \int dx |e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\mathcal{N}|^2 \\
& \text{mit } a = \frac{m\omega}{2\hbar} \\
1 =& \mathcal{N}^2 \int e^{-2ax^2} dx
\end{aligned} \tag{K.2}$$

bestimmt wird. Um dieses Integral zu bestimmen, wendet man den Trick an, dass das Integral mit sich selbst multipliziert wird. Im zweiten Integral wählt man die Variable y. Dadurch kann man von kartesischen Koordinaten auf Po-

larkoordinaten

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy\, e^{-2ax^2} e^{-2ay^2} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy\, e^{-2a(x^2+y^2)} \end{aligned} \tag{K.3}$$

wechseln. Im folgenden Schritt wird die Variablentransformation mit

$$r^2 = x^2 + y^2 \tag{K.4}$$

und der Integrationsvariablen- und Integrationsgrenzentransformation vorgenommen. Dabei muss man beachten das der Radius nur von Null bis unendlich variieren kann und der Winkel ψ von Null bis 2π. Damit ergibt sich

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy\, e^{-2a(x^2+y^2)} = \int_{0}^{+\infty} r\, dr \int_{0}^{2\pi} d\psi\, e^{-2ar^2} \tag{K.5}$$

und die Integration über den Winkel ψ bringt folgendes Ergebnis

$$\int_{0}^{+\infty} r\, dr \int_{0}^{2\pi} d\psi\, e^{-2ar^2} = 2\pi \int_{0}^{+\infty} e^{-2ar^2} dr\,. \tag{K.6}$$

Als nächstes wird eine Substituion mit

$$u = 2a\, r^2 \tag{K.7}$$

und

$$\frac{d\,u}{d\,r} = 4a\, r \tag{K.8}$$

vorgenommen. Damit kann man folgendes schreiben

$$2\pi \int_{0}^{+\infty} e^{-2ar^2} dr = \frac{\pi}{2a} \int_{0}^{+\infty} e^{-u} du = -\frac{\pi}{2a} e^{-u} \Big|_{0}^{+\infty} = \frac{\pi}{2a} \tag{K.9}$$

und da im ersten Schritt für die Transformation von kartesischen auf polare Koordinaten die Funktion mit sich selbst multipliziert wurde, muss man nun noch die Wurzelziehen

$$\int e^{-2ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2a}}\,. \tag{K.10}$$

Dieses Ergebnis wird für die Bestimmung der Normierungskonstante $\mathcal{N}$

$$\begin{aligned} 1 =& \mathcal{N}^2 \int e^{-2ax^2} dx \\ 1 =& \mathcal{N}^2 \sqrt{\frac{\pi}{2a}} = \mathcal{N}^2 \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{2m\omega}} \\ \mathcal{N} =& \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \end{aligned} \tag{K.11}$$

verwendet. Kontrolle der Lösung erfolgt mit der Grundzustandsfunktion und der Grundzustandsenergie

$$\begin{aligned} H\psi_0 =& E_0\psi_0 \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} =& E_0\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ -\left(\frac{\hbar^8 m\omega}{16m^4\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} + \left(\frac{m^5\omega^9}{16\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} x^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} =& E_0\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\ -\left(\frac{\hbar^8 m\omega}{16m^4\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\left(-\frac{m\omega}{\hbar} + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right) + \left(\frac{m^5\omega^9}{16\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} x^2 =& E_0\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \\ \left(\frac{\hbar^3 m\omega^5}{16\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \underbrace{-\left(\frac{m^5\omega^9}{16\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} x^2 + \left(\frac{m^5\omega^9}{16\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} x^2}_{0} =& E_0\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \\ \left(\frac{\hbar^3 m\omega^5}{16\pi}\right)^{\frac{1}{4}} =& E_0\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \\ \left(\frac{\hbar^4\omega^4}{16}\right)^{\frac{1}{4}} =& E_0 \\ E_0 =& \frac{\hbar\omega}{2}\,. \end{aligned} \tag{K.12}$$

Damit wurde gezeigt, dass die bereits gefundene Grundzustandsenergie E_0 mit der im Nachhinein aufgestellten Grundzustandsfunktion $\psi_0(x)$ zusammenhängt.

L Anhang - Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

Zur Bestimmung des Impulses des elektromagnetischen Feldes muss folgendes Integral mit dem Poyntingvektor $\vec{S}$ [Ecker 2008/09, Neufeld 2006/07] gelöst werden:

$$\vec{P} = \frac{1}{c}\int\limits_V d^3x\Big(\vec{E}\times\vec{B}\Big) = \frac{1}{c^2}\int\limits_V d^3x\vec{S}\,. \tag{L.1}$$

Als nächstes wird wieder die zeitliche Ableitung des Impulses vorgenommen und einige Umformungen durchgeführt

$$\begin{aligned}
\dot{\vec{P}} =& \frac{1}{c}\int\limits_V d^3x\Big(\dot{\vec{E}}\times\vec{B}+\vec{E}\times\dot{\vec{B}}\Big)\\
=& \frac{1}{c}\int\limits_V d^3x\Big((c\,\mathrm{rot}\vec{B}-\vec{j})\times\vec{B}+\vec{E}\times(-c\,\mathrm{rot}\vec{E})\Big)\\
=& \int\limits_V d^3x\Big(\mathrm{rot}\vec{B}\times\vec{B}-\vec{E}\times\mathrm{rot}\vec{E}\Big)-\frac{1}{c}\int\limits_V d^3x\Big(\vec{j}\times\vec{B}\Big)\\
=& \int\limits_V d^3x\Big(\mathrm{rot}\vec{B}\times\vec{B}+\mathrm{rot}\vec{E}\times\vec{E}\Big)-\frac{1}{c}\int\limits_V d^3x\Big(\vec{j}\times\vec{B}\Big)\,.
\end{aligned} \tag{L.2}$$

Das Integral mit den beiden Feldkomponenten kann man nun mit Hilfe der Indexschreibweise und der Summenkonventionen weiter bearbeiten

$$\begin{aligned}
&\mathrm{rot}\vec{B}\times\vec{B}+\mathrm{rot}\vec{E}\times\vec{E}\\
=&\varepsilon_{ijk}\Big[(\mathrm{rot}\vec{B})_jB_k+(\mathrm{rot}\vec{E})_jE_k\Big]\\
=&\varepsilon_{ijk}\Big[\varepsilon_{jlm}(\nabla_lB_m)B_k+\varepsilon_{jlm}(\nabla_lE_m)E_k\Big]\\
=&\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{jlm}\Big[(\nabla_lB_m)B_k+(\nabla_lE_m)E_k\Big]\\
=&\Big(\delta_{kl}\delta_{im}-\delta_{km}\delta_{il}\Big)\Big[(\nabla_lB_m)B_k+(\nabla_lE_m)E_k\Big]
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
=&(\nabla_k B_i)B_k - (\nabla_i B_k)B_k + (\nabla_k E_i)E_k - (\nabla_i E_k)E_k \\
=&\nabla_k(B_i B_k) - B_i \underbrace{\nabla_k B_k}_{\mathrm{div}\vec{B}=0} - \frac{1}{2}\nabla_i(B_k B_k) + \nabla_k(E_i E_k) - E_i \underbrace{\nabla_k E_k}_{\mathrm{div}\vec{E}=\rho} - \frac{1}{2}\nabla_i(E_k E_k)
\end{aligned}
\tag{L.3}
$$

und nutzt dieses Ergebnis nun, um die zeitliche Änderung des Impulses

$$
\begin{aligned}
\dot{P}_i^{Feld} =& \underbrace{-\frac{1}{c}\int\limits_V d^3x\Big(\vec{j}\times\vec{B}\Big) - \int\limits_V d^3x\rho E_i}_{-\dot{P}_i^{\text{Teilchen in V}}} \\
&+ \int\limits_V d^3x\Big[\nabla_k\Big(B_i B_k + E_i E_k\Big) - \frac{1}{2}\nabla_i \underbrace{\Big(B_k B_k + E_k E_k\Big)}_{\vec{E}^{\,2}+\vec{B}^{\,2}}\Big] \\
\dot{P}_i^{Feld} + \dot{P}_i^{\text{Teilchen in V}} =& \int\limits_V d^3x\nabla_k\Big[\Big(B_i B_k + E_i E_k\Big) - \frac{1}{2}(\vec{E}^{\,2}+\vec{B}^{\,2})\delta_{ik}\Big] \\
\dot{P}_i^{Feld} + \dot{P}_i^{\text{Teilchen in V}} =& \int\limits_{\partial V} df_k\Big[\Big(B_i B_k + E_i E_k\Big) - \frac{1}{2}(\vec{E}^{\,2}+\vec{B}^{\,2})\delta_{ik}\Big],
\end{aligned}
\tag{L.4}
$$

d.h. die Kraft, zu bestimmen. Die elektrische Komponente des materiefreien Feldes bestimmt sich aus dem Induktionsgesetz wie folgt

$$
\begin{aligned}
\mathrm{rot}\vec{E} =& -\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} \\
\mathrm{rot}\,\mathrm{rot}\vec{E} =& -\frac{1}{c}\mathrm{rot}\frac{\vec{B}}{\partial t} \\
\Big(\mathrm{grad}\,\mathrm{div} - \mathrm{div}\,\mathrm{grad}\Big)\vec{E} =& -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{rot}\vec{B} \\
\mathrm{grad}\underbrace{\mathrm{div}\vec{E}}_{\text{Null, da materiefrei}} - \Delta\vec{E} =& -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{E}}{\partial t} \\
-\Delta\vec{E} =& -\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2} \\
\Delta\vec{E} =& \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{E}}{\partial t^2}\,.
\end{aligned}
\tag{L.5}
$$

Des Weiteren wird die Berechnung der Koeffizienten $c(\vec{k},t)$ ausführlich gezeigt

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\sum_{\vec{k}}\frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}}c_{\vec{k}}(t) =& \Delta\sum_{\vec{k}}\frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}}c_{\vec{k}}(t)\\
\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\sum_{\vec{k}}\frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}}c_{\vec{k}}(t) =& \operatorname{div}\operatorname{grad}\sum_{\vec{k}}\frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}}c_{\vec{k}}(t)\\
\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\sum_{\vec{k}}\frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}}c_{\vec{k}}(t) =& \operatorname{div}\begin{pmatrix}\frac{\partial}{\partial x}\\ \frac{\partial}{\partial y}\\ \frac{\partial}{\partial z}\end{pmatrix}\sum_{k_x}\frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{V}}c_{k_x}(t)\sum_{k_y}\frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{V}}c_{k_y}(t)\sum_{k_z}\frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{V}}c_{k_z}(t)\\
\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\sum_{\vec{k}}\frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}}c_{\vec{k}}(t) =& \begin{pmatrix}\frac{\partial}{\partial x}\\ \frac{\partial}{\partial y}\\ \frac{\partial}{\partial z}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} ik_x\sum_{k_x}\frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{V}}c_{k_x}(t)\sum_{k_y}\frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{V}}c_{k_y}(t)\sum_{k_z}\frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{V}}c_{k_z}(t)\\ ik_y\sum_{k_x}\frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{V}}c_{k_x}(t)\sum_{k_y}\frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{V}}c_{k_y}(t)\sum_{k_z}\frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{V}}c_{k_z}(t)\\ ik_z\sum_{k_x}\frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{V}}c_{k_x}(t)\sum_{k_y}\frac{e^{ik_y y}}{\sqrt{V}}c_{k_y}(t)\sum_{k_z}\frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{V}}c_{k_z}(t)\end{pmatrix}\\
\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\sum_{\vec{k}}\frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}}c_{\vec{k}}(t) =& \begin{pmatrix}\frac{\partial}{\partial x}\\ \frac{\partial}{\partial y}\\ \frac{\partial}{\partial z}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} ik_x\\ ik_y\\ ik_z\end{pmatrix}\sum_{\vec{k}}\frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}}c_{\vec{k}}(t)\\
\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\sum_{\vec{k}}\frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}}c_{\vec{k}}(t) =& \big(-k_x^2-k_y^2-k_z^2\big)\sum_{\vec{k}}\frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}}c_{\vec{k}}(t)\\
\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\sum_{\vec{k}}\frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}}c_{\vec{k}}(t) =& -\vec{k}^{\,2}\sum_{\vec{k}}\frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{\sqrt{V}}c_{\vec{k}}(t)\\
\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}c_{\vec{k}}(t) =& -\vec{k}^{\,2}c_{\vec{k}}(t)\\
\frac{\partial^2}{\partial t^2}c_{\vec{k}}(t) =& -\vec{k}^{\,2}c^2c_{\vec{k}}(t)\,. \qquad \text{(L.6)}
\end{aligned}
$$

Das Induktionsgesetz für materiefreie Felder wird zur Darstellung des Zusammenhangs zwischen magnetischem Feld $\vec{B}$ und elektrischem Feld $\vec{E}$ genutzt:

$$
\begin{aligned}
0 =& rot\vec{E}(t,\vec{x}) + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}(t,\vec{x})}{\partial t} \\
0 =& \varepsilon_{mns}\nabla_n E_s + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}(t,\vec{x})}{\partial t} \\
0 =& \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{V}}\varepsilon_{mns}\nabla_n\Big(e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a + e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a^*\Big)\varepsilon_s + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}(t,\vec{x})}{\partial t} \\
0 =& \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{V}}\varepsilon_{mns}\Big(ik_n e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a - ik_n e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a^*\Big)\varepsilon_s + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}(t,\vec{x})}{\partial t} \\
0 =& \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{V}} i\left(\Big[\vec{k}\times\vec{\varepsilon}\Big]_m e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a - \Big[\vec{k}\times\vec{\varepsilon}\Big]_m e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a^*\right) + \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{B}(t,\vec{x})}{\partial t} \\
\int d\vec{B}(t,\vec{x}) =& -ic\frac{\mathcal{N}}{\sqrt{V}}\int dt\left(\Big[\vec{k}\times\vec{\varepsilon}\Big]_m e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a - \Big[\vec{k}\times\vec{\varepsilon}\Big]_m e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a^*\right) \\
\vec{B}(t,\vec{x}) =& -ic\frac{\mathcal{N}}{\sqrt{V}}\left(\vec{k}\times\vec{\varepsilon}\frac{e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a}{-i\omega} - \vec{k}\times\vec{\varepsilon}\frac{e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a^*}{i\omega}\right) + \vec{B}_0(t,\vec{x}) \\
& \vec{B}_0(t,\vec{x}) = 0 \quad \text{wegen nicht existierenden äußeren Feld} \\
\vec{B}(t,\vec{x}) =& c\frac{\mathcal{N}}{\sqrt{V}}\frac{\vec{k}\times\vec{\varepsilon}}{\omega}\Big(e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a + e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a^*\Big) \\
& \vec{E}(t,\vec{x}) = \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{V}}\Big(e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a + e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a^*\Big)\vec{\varepsilon} \\
\vec{B}(t,\vec{x}) =& \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|}\times\vec{E}(t,\vec{x})\,.
\end{aligned}
\tag{L.7}
$$

Im folgenden wird die Bestimmung der Gesamtenerige des Feldes einer einzelnen ebenen Welle ausgeführt. Dazu werden zuerst die Absolutquadrate der elektrischen Feldenergie

$$
\begin{aligned}
\vec{E}(\vec{x},t)^2 &= \frac{\mathcal{N}^2}{V}\Big(e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a + e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a^*\Big)\Big(e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a^* + e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a\Big) \\
&= \frac{\mathcal{N}^2}{V}\Big(aa^* + a^*a + e^{-2i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}a^*a^* + e^{2i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)}aa\Big)
\end{aligned}
\tag{L.8}
$$

und der magnetischen Feldenergie

$$\begin{aligned}
\vec{B}(t,\vec{x}) &= \frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \times \vec{E}(t,\vec{x}) \Rightarrow \vec{B} \perp \vec{E} \\
\vec{B}(\vec{x},t) &= \frac{\mathcal{N}}{\sqrt{V}} \Big(e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} a - e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} a^* \Big) \vec{\varepsilon}_{\perp \vec{E}} \\
\vec{B}(\vec{x},t)^2 &= \frac{\mathcal{N}^2}{V} \Big(e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} a - e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} a^* \Big) \Big(e^{-i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} a^* - e^{i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} a \Big) \\
&= \frac{\mathcal{N}^2}{V} \Big(aa^* + a^*a - e^{-2i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} a^*a^* - e^{2i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} aa \Big) \vec{\varepsilon}
\end{aligned} \tag{L.9}$$

berechnet. Damit ergibt sich die Feldenergie zu

$$\begin{aligned}
u =& \frac{1}{2} \Big(E^2 + B^2 \Big) \\
=& \frac{1}{2} \frac{\mathcal{N}^2}{V} \Big(aa^* + a^*a + e^{-2i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} a^*a^* + e^{2i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} aa \\
& \qquad + aa^* + a^*a - e^{-2i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} a^*a^* - e^{2i(\vec{k}\vec{x}-\omega_{\vec{k}}t)} aa \Big) \\
u =& \frac{\mathcal{N}^2}{V} \Big(aa^* + a^*a \Big)
\end{aligned} \tag{L.10}$$

Nun ergibt sich die Gesamtenergie des Feldes zu:

$$\begin{aligned}
\varepsilon = \int_V d^3x \, u =& \frac{\mathcal{N}^2}{V} (aa^* + a^*a) L_x L_y L_z = \mathcal{N}^2 (aa^* + a^*a) \\
& \text{mit } V = L^3 \quad \text{wobei } L_x = L_y = L_z \, .
\end{aligned} \tag{L.11}$$

M Anhang - Bestimmung der Wellenzahl für rotes Licht

Es wird bei dem transparenten Material Kronglas mit einem Brechungsindex von $n_G = 1,5$ verwendet. Damit kann man die Phasengeschwindigkeit eines Photons im Kronglass berechnen

$$n_G = \frac{c_V}{c_G} \Rightarrow c_G = \frac{c_V}{n_G} = \frac{299792458\frac{m}{s}}{1.5} = 19986163\frac{m}{s}\,. \tag{M.1}$$

Aus der Lichtgeschwindigkeit im Kronglas kann man nun die Wellenlänge λ_{Rot} für ein Rotes Photon mit der Frequenz $f_{Rot} = 430\text{THz}$ wie folgt berechnen

$$\lambda_{\text{rot}} = \frac{c_G}{f_{\text{rot}}} = 464\text{nm}\,. \tag{M.2}$$

Damit liegt die Wellenlänge von rotem Licht im Glas im Bereich der Wellenlänge für blaues Licht im Vakuum. Beim Durchgang durch ein transparentes Medium ändert sich nicht die Energie des Lichts, die wir als Farbe empfinden. Daher bleibt rotes Licht auch im Glas rotes Licht, nur die Wellenlänge reduziert sich wegen der geringeren Phasengeschwindigkeit. Mit Hilfe der gefundenen Wellenlänge kann nun die Wellenzahl für ein rot erscheinendes Photon berechnet werden

$$k_{\text{rot}} = k_G = \frac{2\pi}{\lambda_{\text{rot}}} = 135 \cdot 10^5 \frac{1}{m}\,, \tag{M.3}$$

die für die Berechnung Amplituden T und R sowie den zugehörigen Betragsquadraten verwendet wurde.

Literaturverzeichnis

[Anastasiou 2012] Charalampos Anastasiou: *Übungsserie zur Quantenmechanik 1*: Herbstsemester 2012: ETH Zürich: 2012

[Apolin 2008] Martin Apolin: *Big Bang Physik 7*: öbv: Wien: 2008

[Apolin 2011] Martin Apolin: *vom kompetenzorientierten Unterricht zur kompetenzorientierten Matura*: Vortrag im Rahmen der Direktor/innenklausur Altlengbach: 28. November 2011

[Basdevant 2002] Jean-Louis Basdevant, Jean Dalibard: *Quantum Mechanics*: Springer Verlag: Heidelberg: 2002

[Bader 1996] Franz Bader: *Eine Quantenwelt ohne Dualismus* (inklusive SoftwareCD): Schroedel Verlag: Hannover: 1996

[Bader/Dorn 2007] Franz Bader, Friedrich Dorn: *Physik 3*: öbv: Wien: 5. Auflage: 2007

[Bertlmann 2008] Reinhold A. Bertlmann: *Theoretical Physics T2 - Quantum Mechanics*: Vorlesungsskript: Institut für Theoretische Physik der Universität Wien: Sommersemester 2008

[Binney 2009] James Binney: *Introduction to Quantum Mechanics*: Wintersemester 2009: Oxford Unversity: 2009

[Blatter 2005] Gianni Blatter: *Vorlesungsskript Quantenmechanik 1*: Herbstsemester 2005: ETH Zürich: 2005

[Blau 2006/07] Matthias Blau: *A Path Integral Approach To Quantum Mechanics*: Vorlesungsskript: Institut de Physique, Université de Neuchâtel: Wintersemester 2006/07

[BMUKK-Englisch 2004] BMUKK: *Lehrplan Englisch Oberstufe AHS*: 8.7.2004

[BMUKK-Mathematik 2004] BMUKK: *Lehrplan Mathematik Oberstufe AHS*: 8.7.2004

[BMUKK-Physik 2004] BMUKK: *Lehrplan Physik Oberstufe AHS*: 8.7.2004

[Capri 2002] Anton Z. Capri: *Problems and Solutions in Nonrelativistic Quantum Mechanics*: World Scientific Publishing Co Pte. Ltd.: Singapur: 2002

[CEFR 2001] Council of Europe: *Common European Framework of References for Languages - Learning, Teaching, Assessment*: Cambridge University Press: Cambridge: 2001

[Christian 2000] Wolfgang Chrsitian: *Quantenphysik*: http://www.muk.uni-hannover.de/~finke/physlet/quanten.html: 10. Juni 2012

[Cohen-Tannoudji 2007] Claude Cohen-Tannoudji et al: *Quantenmechanik Band 1*: 3. Auflage: Walter de Gryuter: Berlin, New York: 2007

[Corput 1936] Johannes van der Corput: *Zur Methode der stationären Phase - zweite Mitteilung*: Compositio Mathematica: tome 3 (1936): S. 328-372

[Dalton-Puffer 2007] Christiane Dalton-Puffer: *Discourse in Content and Language Integrated Learning (CLIL) Classrooms*: John Benjamins Publishing Company: Amsterdam: 2007

[Doubek 2004] Walter Doubek: *Quantenphysik im Schulunterricht*: Diplomarbeit: Fakultät für Naturwissenschaft und Mathematik der Universität Wien: 2004

[Ecker 2008/09] Gerhard Ecker: *Elektrodynamik - Theoretische Physik 3*: Vorlesungsskript: Institut für Theoretische Physik der Universität Wien: Wintersemester 2008/09

[Embacher 2000] Franz Embacher: *Quantentheorie - Unterrichtskonzept, ein ungewöhnlicher Einstieg*: http://homepage.univie.ac.at/Franz.Embacher/MERLIN_MPI/konzept.htm: 2000

[Feynman 2010] Richard Feynman: *The Feynam Lectures on Physics Volume III*: Basic Books: New York: 2010

[Feynman 2006] Richard Feynman: *QED The Strange Theory of Light and Matter*: Princeton Science Library: Princeton: 2006

[Feynman 1965] Richard Feynman: *Quantum Mechanics and Path Integrals*: McGraw-Hill Book Company: New York: 1965

[Feynman 1948] Richard Feynman: *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics*: Review of Modern Physics 20: S. 367-387: 1948

[Fließbach 2008] Torsten Fließbach, Hans Walliser: *Arbeitsbuch zur theoretischen Physik*: Spektrum Akademischer Verlag: Heidelberg: 2. Auflage: 2008

[Grau 1993] Dietrich Grau: *Übungsaufgaben zur Quantentheorie*: Carl Hanser Verlag: München/Wien: 3. Auflage: 1993

[Gros 2006] Claudius Gros: *Vorlesungsskript Quantenmechanik 1*: Sommersemester 2006: J.W. Goethe Universität zu Frankfurt am Main: 2006

[Gruber 2008] Werner Gruber et al: *Ganz klar Physik 4*: Jugend und Volk Verlag: Wien: 2008

[Hager 2011] Roman Hager et al: *Von der Physik 4*: E. Dorner Verlag: Wien: 3. Auflage 2011

[Harrison 2002] David Harrison: *The Feynman Double Slit*: http://www.upscale.utoronto.ca/GeneralInterest/Harrison/DoubleSlit/DoubleSlit.html: 20. Mai 2012

[Herr 2011] Horst Herr et al: *Technische Physik*: Verlag Europa Lehrmittel: Haan-Gruiten: 5. Auflage 2011

[Hopf 2011] Martin Hopf et al: *Physikdidaktik kompakt*: Aulis Verlag: 2011

[Hopf 2012] Martin Hopf (Koordinator): *Die kompetenzorientierte Reifeprüfung Physik - Richtlinien und Beispiele für Themenpools und Prüfungsaufgaben*: BMUKK: 2012

[Jahns 2001] Jürgen Jahns: *Photonik: Grundlagen, Komponenten und Systeme*: Oldenbourg Verlag: Wien: 2001

[Jaros 2007] Albert Jaros et al: *Physik compact Basiswissen 8*: öbv: Wien: 2007

[Jaros 2007] Albert Jaros et al: *Physik compact Basiswissen 7*: öbv: Wien: 2007

[KSU 2004] Sanjay Rebello et al: *Visual Quantum Mechanics*: http://phys.educ.ksu.edu/vqm/index.html: 28. Juni 2012

[Komma 1994] Michael Komma: *Licht im Medium*: http://www.mikomma.de/optik/disp/dispersion.htm: 20. Mai 2012

[Komma 1994] Michael Komma: *Are There Quantum Jumps?*: http://www.mikomma.de/schroe/quantumjumps.htm: 20. Juni 2012

[Komma 1994] Michael Komma: *Feynmans Herleitung der Schrödinger Gleichung*: http://www.mikomma.de/qph3htm/feynschroe/feyschroe.html: 23. Juni 2012

[Kraker 2003] Norbert Kraker et al: *Physik HAK*: E. Dorner Verlag: Wien: 2003

[Leifi 2012] http://www.leifiphysik.de/web_ph11_g8/materialseiten/07_quanten.htm: 24. Mai 2012

[Lindner 2010] Klaus Lindner et al: *Physik Oberstufe - Zusatzmaterial*: http://www.cornelsen.de/interaktiv/1.c.1835056.de: 5. Juni 2012

[LMU-milq 2012] Lehrstuhl für Didaktik der LMU München: *milq - Münchener Internetprojekt zur Lehrerfortbildung in Quantenmechanik*: http://homepages.physik.uni-muenchen.de/~milq 14. März 2012

[LMU-Konzepte 2012] Lehrstuhl für Didaktik der LMU München: *milq - Münchener Internetprojekt zur Lehrerfortbildung in Quantenmechanik*:http://homepages.physik.uni-muenchen.de/~milq/konzepte/kon5p01.html 16. Juli 2012

[MindBluff 2003] http://mindbluff.com/antiparticles.htm, 22. Mai 2012

[Neufeld 2006] Helmut Neufeld: *Theoretische Physik für das Lehramt L1*: Vorlesungsskript: Fakultät für Physik der Universität Wien: Sommersemester 2006

[Neufeld 2006/07] Helmut Neufeld: *Theorestische Physik für das Lehramt L2* - Teil 1 Quantenmechanik: Vorlesungsskript: Fakultät für Physik der Universität Wien: Wintersemester 2006/07

[Neufeld 2006/07] Helmut Neufeld: *Theorestische Physik für das Lehramt L2 - Teil 2 Statistische Physik und Thermodynamik*: Vorlesungsskript: Fakultät für Physik der Universität Wien: Wintersemester 2006/07

[Neufeld 2012] Helmut Neufeld: *Theoretische Physik T2 - Quantenmechanik I*: Vorlesungsskript: Fakultät für Physik der Universität Wien: Sommersemester 2012

[Pospiech 2004] Gesche Pospiech: *Moderne Quantenphysik im Unterricht*: Logos: Berlin: 2004

[Putz 2009] Bruno Putz: *Faszination Physik 3+4*: Veritas Verlag: Linz: 3. Auflage 2009

[Rainer 2003] Rainer Müller: *Schülervorstellungen zur Quantenphysik: in Quantenphysik in der Schule*: Logos Verlag: Berlin 2003: S. 239-263

[Rameis 2008] Georg Rameis: *Physik - Energie, Raum, Zeit HAK II*: Manz Verlag: Wien: 2008

[Reineker 2008] Peter Reineker et al: *Theoretische Physik IV*: 1. Auflage: Wiley-VCH Verlag: Weinheim: 2008

[Reinhardt 2012] Hugo Reinhardt: *Quantenmechanik 1 - Pfadintegralformulierung und Operatorformalismus*: Oldenbourg Verlag: München: 2012

[Renner 2011] Renato Renner: *Vorlesungsskript Quantenmechanik 1*: Herbstsemester 2011: ETH Zürich: 2011

[Rieger 2012] Heiko Rieger: *Vorlesungsskript Theoretische Physik 3 - Quantenmechanik 1*: Sommersemester 2012: Universität des Saarlandes: 2012

[Rupp 2010] Romano Rupp: *Prinzpien der Modernen Physik*: Vorlesungsskript: Institut für Theoretische Physik der Universität Wien: Sommersemester 2010

[Schreiner 1978] Josef Schreiner: *Physik für die Sekundarstufe II*: Verlag Moritz Diesterweg: Frankfurt am Main: 1978: Ausgabe für Deutschland

[Schwabl 2007] Franz Schwabl: *Quantenmechanik - Eine Einführung*: Springer-Verlag: 7. Auflage: Berlin Heidelberg: 2007

[Sexl 2006] Roman U. Sexl et al: *Physik 7*: öbv: Wien: 2006

[Sexl 2007] Roman U. Sexl et al: *Physik 8*: öbv: Wien: 2007

[Siller 2008] Hans-Stefan Siller: *Bildungsstandards im Fach Mathematik*: Universität Salzburg: Salzburg: Version 2: 2008

[Spahn 2008] Frank Spahn: *Vorlesungsskript Quantenmechanik 1*: Sommersemester 2008: Universität Potsdam: 2008

[Sutherland 2012] Mark Sutherland: *Mark's Quantum Mechanics Applets*:http://www.harfesoft.de/aixphysik/quanten/Mark/index.html: 1. Juli 2012

[Teider 2003] Olga Teider: *Einführung in die Quantentheorie*: http://www.uni-ulm.de/fileadmin/website_uni_ulm/nawi.inst.251/Didactics/quantenchemie/html/inhalt.html: 25. Juni 2012

[VEGA 2001] VEGA presents *Richard Feynman's The Douglas Robb Memorial Lecture*: http://www.vega.org.uk/: 15. April 2012

[Walet 2005] Niels Walet: *Lecture notes - Quantum Mechanics 1* in http://walet.phy.umist.ac.uk/QM/LectureNotes/QM.html: Sommersemester 2005: University of Manchaster: 20. September 2012

Angaben zum Autor

Sept. 2008 - Dec. 2012	Studium der Unterrichtsfächer Physik und Englisch an der Universität Wien
Jan. 2003 - Dec. 2003	Referendariat für berufliche Schulen an der Beruflichen Schule Elektrotechnik/Elektronik Rostock, Deutschland
Jan. 2002 - Dec. 2002	Fremdsprachenassistent am Mill Park Secondary College und Viewbank College, Australien
Jan. 2001 - Dec. 2001	Referendariat für berufliche Schulen an der Beruflichen Schule Elektrotechnik/Elektronik Rostock, Deutschland
Okt. 1995 - Dec. 2000	Studium der Unterrichtsfächer Elektrotechnik und Englisch an der Universität Rostock, Deutschland
Sept. 1998 - Mai 1999	Research Assistant an der East Tennessee State University, USA
Sept. 1989 - Feb. 1993	Ausbildung zum Energieelektroniker für die Deutsche Seereederei Rostock, Deutschland
Sept. 1991 - Juni 1993	Abitur an der Volkshochschule Stralsund, Deutschland
Sept. 1979 - Juni 1989	Polytechnische Oberschule Juri Gagarin, Stralsund, Deutschland