

**Transport physikalischer Größen:
Mehrdimensionale Quantilbewegung
und Flußlinien im Phasenraum**

DISSERTATION

zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften

vorgelegt von

Dipl.-Phys. Tilo Stroh

aus Siegen

eingereicht beim Fachbereich 7
der Universität Siegen

Siegen 2006

Gutachter der Dissertation: Prof. Dr. H. D. Dahmen
Prof. Dr. S. Brandt

Datum der Disputation: 8. Juni 2006

Internetpublikation der Universitätsbibliothek Siegen:
Uniform Resource Name: **urn:nbn:de:hbz:467-2213**

Abstract

Transport of Physical Quantities: More-Dimensional Quantile Motion and Flux Lines in Phase Space

The transport of physical quantities such as energy, probability, like-sign charges is studied. Conserved physical quantities described by a density ϱ and a current density \vec{j} satisfy a continuity equation $\partial\varrho/\partial t + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$. For positive density, $\varrho \geq 0$, quantile trajectories $\vec{r}_c(t)$ can be defined. They satisfy the differential equation $d\vec{r}_c(t)/dt = \vec{j}/\varrho$. In this context Bohm's trajectories obtain a probabilistic interpretation. The concepts developed here are applied to the probability density and energy density, respectively, and the corresponding current density of (a) the two-dimensional Gaussian wave packet and (b) the electromagnetic dipole radiation.

The Wigner distribution in phase space of a quantum-mechanical wave function is not positive everywhere, however, the domains of negative values cover small phase-space volumes of the size of Planck's quantum h for a one-dimensional problem. The current density associated with the Wigner distribution is chosen such that $\dot{x} = p/m$ is maintained as one of the equations of motion. The phase-space flux lines (trajectories) of a number of quantum-mechanical systems are computed and graphically displayed.

Zusammenfassung

Der Transport physikalischer Größen wie Energie, Wahrscheinlichkeit, Ladungen gleichen Vorzeichens wird studiert. Erhaltene physikalische Größen, beschrieben durch eine Dichte ϱ und eine Stromdichte \vec{j} , erfüllen eine Kontinuitätsgleichung $\partial\varrho/\partial t + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$. Für positive Dichten, $\varrho \geq 0$, können Quantiltrajektorien $\vec{r}_c(t)$ definiert werden. Sie erfüllen die Differentialgleichung $d\vec{r}_c(t)/dt = \vec{j}/\varrho$. In diesem Rahmen erhalten die Bohmschen Trajektorien eine wahrscheinlichkeitstheoretische Interpretation. Die hier entwickelten Konzepte werden auf die Wahrscheinlichkeitsdichte und die Energiedichte angewandt, sowie auf die entsprechenden Stromdichten (a) des zweidimensionalen gaußschen Wellenpakets und (b) der elektromagnetischen Dipolstrahlung.

Die Wigner-Verteilung im Phasenraum einer quantenmechanischen Wellenfunktion ist nicht überall positiv, die Domänen negativer Werte überdecken hingegen kleine Phasenraumvolumina von der Größe des Planckschen Wirkungsquantums h für ein eindimensionales Problem. Die mit der Wigner-Verteilung verknüpfte Stromdichte ist so gewählt, daß $\dot{x} = p/m$ als eine Bewegungsgleichung beibehalten wird. Die Flußlinien (Trajektorien) im Phasenraum werden für eine Anzahl quantenmechanischer Systeme berechnet und graphisch dargestellt.

Inhaltsverzeichnis

Abstract	iii
Zusammenfassung	iv
Einleitung	1
1 Quantilbewegung	4
1.1 Transport in einer Dimension	4
1.1.1 Quantiltrajektorie	6
1.1.2 Transport-Invariante	7
1.2 Quasi-eindimensionale Behandlung räumlicher Dichten	8
1.2.1 Ebenen: Lateral integrierte Dichten	8
1.2.2 Kugelflächen: Sphärisch integrierte Dichten	9
1.3 Allgemeine Definition des Quantils	9
1.3.1 Die Invarianzbedingung	9
1.3.2 Krummlinige Koordinaten	11
1.3.3 Zeitabhängige krummlinige Koordinaten	13
1.3.4 Transport-Invariante	14
1.3.5 Differentialgleichung für die Ankunftszeitfunktion	14
1.3.6 Geometrische Konstruktion	16
1.3.7 Wahl der Flächen und der Parametrisierung	18
1.3.8 Konstruktion der invarianten Größen	19
1.3.9 Alternative Parametrisierung	21
1.3.10 Spezialisierung der krummlinigen Anfangskoordinaten	23
1.3.11 Signaltransport. Bohmsche Trajektorien	24
1.4 Das freie gaußsche Wellenpaket	26
1.5 Energiefluß der klassischen elektromagnetischen Dipolstrahlung	33
1.6 Detektorverbindungskurven	37
1.6.1 Algorithmische Bestimmung der Detektorverbindungskurven	38
1.6.2 Die Hauptroutine	40
1.6.3 Integration der Stromdichten	45
1.6.4 Bestimmung der einem Ort zugeordneten Zeit	47
1.7 Darstellung von Stromtrajektorien und Detektorverbindungskurven	49
1.8 Diskussion	55

2	Transport im Phasenraum	57
2.1	Klassischer Phasenraum und Liouville-Theorem	57
2.2	Hamilton-Funktion und Phasenraumverteilung	59
2.3	Ströme und Kontinuitätsgleichung im Phasenraum	61
2.4	Beispiele vorgegebener klassischer Verteilungen	62
2.5	Liouville-Theorem und Eindeutigkeit	67
2.6	Der quantenmechanische Phasenraum. Wigner-Verteilungen . . .	68
2.7	Wigner-Verteilungen asymptotischer Streuzustände eindimensio- naler Potentiale	71
2.8	Zeitentwicklung und Ströme der Wigner-Verteilung	74
2.9	Wigner-Verteilungen gebundener Zustände eindimensionaler Stu- fenpotentiale	76
2.9.1	Ströme und Stufenpotentiale	79
2.9.2	Numerische Implementierung	89
2.9.3	Eigenzustände im tiefen Kasten	91
2.9.4	Wellenpaket im tiefen Kasten	95
2.9.5	Streuung an Potentialbarrieren	97
2.9.6	Korrelationen in Wigner-Verteilungen	106
2.10	Definition von Trajektorien (Flußlinien)	109
2.10.1	Nullstellen und Reparametrisierung	112
2.11	Numerische Berechnung von Trajektorien im Phasenraum	113
2.12	Trajektorien in verschiedenen Systemen	115
2.12.1	Eigenzustände im tiefen Kasten	115
2.12.2	Wellenpaket im tiefen Kasten und Streuung an Potential- barrieren	125
2.12.3	Korrelierte Systeme	135
2.13	Mehrdimensionale Verallgemeinerung	136
2.14	Alternative Ansätze	138
A	Quantenmechanische Dichten und Ströme. Erhaltungsgrößen	141
A.1	Lagrange-Dichte und Energieerhaltung	141
A.2	Energiedichten und Kontinuitätsgleichung	142
A.2.1	Indefinitheit der Energiedichte	144
A.2.2	Energiedichte als Randverteilung der Wigner-Verteilung . .	146
A.3	Weitere dynamische Analogien zur Mechanik	147
A.4	Hydrodynamische Interpretation und Bohmsche Mechanik	150
A.5	Vielteilchendichten	151
B	Eindimensionale Stufenpotentiale	154
B.1	Streuzustände. Orthogonalität. Normierung	156
B.2	Gebundene Zustände. Eigenwertsuche	161
B.3	Zerlegung gaußscher Wellenpakete	164
B.4	Asymptotische Beiträge an Potentialstufen	166

C Parametrische Oszillation und Gauß-Pakete	170
C.1 Quantenmechanische Behandlung	170
C.2 Wigner-Funktion	172
C.3 Änderung der Breite eines Pakets	173
Zusammenfassung	174
Literaturverzeichnis	177

Einleitung

Im Mittelpunkt dieser Arbeit steht der Transport physikalischer Größen. Die Betrachtung dieses Gebiets geschieht dabei im wesentlichen aus zwei Perspektiven. Im ersten Teil werden positiv definite Dichten und die zugehörigen Ströme in einer allgemeinen Weise untersucht. Der zweite Teil beschäftigt sich mit dem Transport im Phasenraum, insbesondere mit dem von indefiniten Quasi-Wahrscheinlichkeiten der Wigner-Funktion des quantenmechanischen Phasenraums.

Eine kausale Verknüpfung von zwei Raumpunkten durch den Transport einer physikalischen Größe G kann allgemein nur mit erhaltenen positiv definiten Größen bzw. Dichten erreicht werden. Die wichtigsten Größen dieser Art sind die Wahrscheinlichkeit bzw. deren Dichte, wie sie in der nichtrelativistischen Quantenmechanik auftritt, und die Energie bzw. deren Dichte, die beispielsweise in der Elektrodynamik von zentraler Bedeutung ist. Ein mit dem Transport direkt verknüpftes Problem ist die Definition der Geschwindigkeit und der Ankunftszeit eines Signals. Die Bestimmung der Ankunft eines Signals ist daher immer mit der Messung einer (dort als positiv zu betrachtenden) physikalischen Größe verbunden, wobei bei der Messung an verschiedenen Orten immer gleiche (absolute) Mengen derselben Größe miteinander zu vergleichen sind, was der Verwendung desselben oder eines identischen Detektors an verschiedenen Raumpunkten entspricht. Davon abweichende Definitionen, die sich z. B. auf relative Bruchteile eines einen Ort passierenden Signals beziehen, führen im allgemeinen (d. h. bei bestimmten Signalformen) zu Akausalitäten.

Die eindimensionale Behandlung des Detektorkonzepts führt auf die Forderung der Konstanz eines Bruchteils der Menge einer in einem Wellenpaket oder Signal enthaltenen physikalischen Größe rechts oder links eines Raumpunktes. Dieser Raumpunkt wird (in Anlehnung an den wahrscheinlichkeitstheoretischen Ursprung) das zum Bruchteil der Menge gehörende Quantil genannt. In [8] wird das Konzept der Quantilbewegung für das quantenmechanische Wellenpaket eingeführt, wobei auch der allgemeinere Fall von Verlusten erörtert wird. Die sich aus dieser Betrachtung ergebenden Quantiltrajektorien stimmen mit den Bohmschen Bahnen [3, 4] einer Wellenfunktion überein. Es kann gezeigt werden [24, 8], daß die Bewegung einer Quantiltrajektorie für ein an einem nichtnegativen Potential gestreutes Wellenpaket gegenüber einem gleich präparierten, sich frei bewegenden Wellenpaket verzögert ist. In dieser Interpretation findet z. B. kein in-

stantanes Tunneln statt. Als Anwendung des Quantilkonzepts wurde z. B., zur Untersuchung des Hegerfeldt-Paradoxons, der Energietransport für ein sich nach der Klein–Gordon-Gleichung ausbreitendes Signal betrachtet [30]. Des weiteren wurde der elektromagnetische (lateral integrierte) Energietransport durch verengte Hohlleiter (elektromagnetisches Tunneln) und durch dispersive Medien untersucht [24, 16]. Der Energietransport erfolgt dabei relativistisch kausal, d. h. es treten keine Überlichtgeschwindigkeiten auf. Für die elektromagnetische Signalausbreitung ist die Energiegeschwindigkeit bzw. die Quantilgeschwindigkeit der Energiedichte neben der Frontgeschwindigkeit, die gleich der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum ist und als Quantilgeschwindigkeit im Grenzwert für verschwindende Energiemengen betrachtet werden kann, das einzige allgemeingültige Konzept, das als Basis für die Beschreibung der Signalausbreitung dienen kann [35].

Bislang wurde der Transport einer physikalischen Größe in eindimensionalen bzw. quasi-eindimensionalen Anordnungen betrachtet. In [8] wurde bereits eine mögliche mehrdimensionale Verallgemeinerung des Quantilkonzepts angedeutet. Im ersten Teil dieser Arbeit werden die Möglichkeiten einer mehrdimensionalen Erweiterung untersucht wie auch die Grenzen und Einschränkungen diskutiert.

Die klassische Mechanik erlaubt die gleichzeitige beliebig genaue Messung von Ort und Impuls eines Teilchens. Diese beiden konjugierten Variablen spannen den Phasenraum auf und erfüllen in bestimmten (d. h. Hamiltonschen) Systemen die Hamiltonschen Gleichungen. In diesem Raum kann die Teilchenbewegung als Kurve bzw. als Phasenraumtrajektorie dargestellt werden. Für ein Teilchenensemble betrachtet kann man die Zeitentwicklung von Phasenraumverteilungen untersuchen, die auch als Wahrscheinlichkeitsverteilungen für ein Teilchen verstanden werden können.

Die nichtrelativistische Quantenmechanik läßt sich sowohl im Ortsraum wie auch im Impulsraum (vollständig) beschreiben. Beginnend mit Wigner [67] wurden Quasi-Verteilungen im Phasenraum eingeführt, die eine Beschreibung der Quantenmechanik unter gleichzeitiger Verwendung von Ort und Impuls erlauben. Die dort eingeführte Wigner-Funktion besitzt zwar die quantenmechanischen Verteilungen für Ort und Impuls als Randverteilung und ist selbst reell, ist aber bis auf Ausnahmen nicht positiv definit. Eine weitere häufig verwendete Verteilung ist die Husimi-Funktion, die z. B. durch Integration der Wigner-Funktion mit einer Wigner-Funktion eines kohärenten Zustands entsteht. Die Husimi-Funktion ist zwar positiv definit, besitzt aber z. B. als Randverteilung nicht mehr die Orts- und Impulsverteilung. Es existiert keine Phasenraum-Quasi-Verteilung, die alle wünschenswerten Eigenschaften besitzt [31, 42] (von denen hier lediglich ein paar genannt sind). Dagegen existieren viele Quasi-Verteilungen [12, 42], die sämtlich eine äquivalente Beschreibung des quantenmechanischen Systems zulassen. Es ist allgemeiner Konsens, daß die Ursache für die verschiedenen möglichen Phasenraumdarstellungen in der Unschärferelation liegt.

Mit Phasenraumverteilungen werden beispielsweise Unterschiede oder Korrespondenzen zur klassischen Dynamik untersucht [48, 42]. Insbesondere werden

klassisch chaotischen Systemen betrachtet [25], wobei aufgrund der geringeren Variabilität die Husimi-Funktion oft die Phasenraumdarstellung der Wahl ist [42]. Von besonderem Interesse ist der Phasenraum in der Quantenoptik [53], wobei elektrische und magnetische Feldkomponenten von Photonenzuständen mit Impuls und Ort identifiziert werden, womit der Phasenraum auf optischem Wege einer Messung zugänglich wird.

Durch die Messung von Projektionen unbekannter Quantenzustände auf bekannte Quantenzustände mit veränderbaren Parametern können Projektionen der zugehörigen Wigner-Funktionen aufeinander bestimmt werden [22]: Werden die bekannten Quantenzustände geeignet gewählt, so ist eine experimentelle Bestimmung von Phasenraumfunktionen möglich. Über die Messung mit vielen verschiedenen stark x - p -korrelierten Zuständen kann die Wigner-Funktion mittels der sogenannten tomographischen Methode, d. h. mit einer inversen Radon-Transformation rekonstruiert werden. Eine Messung mit kohärenten Zuständen liefert direkt eine Husimi-Funktion, und der Überlapp mit Oszillator-Eigenfunktionen erlaubt eine punktweise Bestimmung der Wigner-Funktion um den jeweiligen Mittelpunkt des Oszillators im Phasenraum. Über den Zusammenhang der Wigner-Funktion mit der Dichtematrix kann damit eine quantenmechanische Wellenfunktion in ihren wesentlichen Teilen experimentell gemessen werden.

Beim Vergleich klassischer und quantenmechanischer Phasenraumfunktionen stellt sich die Frage, ob und wie in Analogie zur klassischen Beschreibung Teilchentrajektorien oder Flußlinien (in einer hydrodynamischen Betrachtung) definiert werden können, die die Dynamik der Phasenraumfunktionen beschreiben. Die Dynamik der Wigner-Funktion, beschrieben durch die Wigner-Moyal-Gleichung, unterscheidet sich von der klassischen, wenn Potentiale stärker als quadratisch in den Koordinaten variieren. In [43] wurden sogenannte „Wigner-Trajektorien“ eingeführt, mit denen die Zeitentwicklung der Wigner-Funktion näherungsweise beschrieben werden kann, wenn die Abweichungen vom klassischen Verhalten gering sind. Eine hydrodynamische Formulierung in der (positiv definiten) Darstellung durch kohärente Zustände (Husimi-Funktion) mit der Definition von Flußlinien für die Zeitentwicklung wurde in [54] untersucht.

Die Wigner-Funktion besitzt viele Gemeinsamkeiten mit klassischen Phasenraumverteilungen [31, 42], ist allerdings nicht positiv definit. Eine anfänglich positive Verteilung kann in der Zeitentwicklung negative Bereiche ausbilden. Der zweite Teil dieser Arbeit befaßt sich mit der Definition von Stromdichten zur Wigner-Funktion wie mit der Berechnung von Trajektorien bzw. Flußlinien, die auf den Stromdichten basieren. Dabei wird insbesondere das zeitweise akausale Verhalten der so definierten Trajektorien untersucht.

Kapitel 1

Quantilbewegung

1.1 Transport in einer Dimension

Eine (positiv definite) Größe G werde durch eine zeitabhängige Dichte $\varrho(t, x)$ beschrieben. Zur Detektion dieser Größe verlangt man, daß sich rechts (oder links) eines Raumpunktes ein bestimmter Bruchteil der ursprünglichen Menge dieser Größe befindet [8, 15, 16, 24, 30, 6, 9],

$$\int_{x_Q}^{\infty} \varrho(t, x') dx' = Q \quad .$$

Für festes x_Q kann so eine Ankunftszeit definiert werden. Zu einer normierten (zeitunabhängigen) Verteilung $\varrho(x)$ definiert die Beziehung das zum Quantum Q gehörige Quantil $x = x_Q$ [5]. Als physikalische Beispiele seien die Aufsammlung elektrischer Ladung eines Vorzeichens auf einer Kondensatorplatte, der Durchtritt von Flüssigkeit oder Gas durch eine (ebene) Fläche oder die Absorption von Energie an einer Fläche genannt.

Man kann nun weitergehend zu jedem Zeitpunkt t den Ort $x = x_Q(t)$ bestimmen, bei dem das Integral den konstanten Wert Q liefert,

$$\int_{x_Q(t)}^{\infty} \varrho(t, x') dx' = Q = \text{const} \quad . \quad (1.1)$$

Erfüllen die Dichte $\varrho(t, x)$ und eine zugehörige Stromdichte $j(t, x)$ eine Kontinuitätsgleichung,

$$\frac{\partial \varrho(t, x)}{\partial t} + \frac{\partial j(t, x)}{\partial x} = 0 \quad , \quad (1.2)$$

so erhält man durch (totale) zeitliche Differentiation von (1.1)

$$0 = -\frac{dx_Q(t)}{dt} \varrho(t, x_Q(t)) + \int_{x_Q(t)}^{\infty} \frac{\partial \varrho(t, x')}{\partial t} dx'$$

mit

$$\int_{x_Q(t)}^{\infty} \frac{\partial \varrho(t, x')}{\partial t} dx' = - \int_{x_Q(t)}^{\infty} \frac{\partial j(t, x')}{\partial x'} dx' = j(t, x_Q(t)) \quad ,$$

wenn $j(t, x)$ für große x verschwindet. Division durch die Dichte führt zur Differentialgleichung

$$\frac{dx_Q(t)}{dt} = \frac{j(t, x_Q(t))}{\varrho(t, x_Q(t))} \quad (1.3)$$

für das Quantil $x_Q(t)$, deren implizite Lösung durch (1.1) gegeben ist. Dabei ist

$$v(t, x) = \frac{j(t, x)}{\varrho(t, x)} \quad (1.4)$$

das Geschwindigkeitsfeld der Strömung.

Die Bedingung (1.1) für die Funktion $x_Q(t)$ kann in die Form der Gleichung

$$Q(t, x_Q(t)) = Q = \text{const}$$

mit der Funktion

$$Q(t, x) = \int_x^{\infty} \varrho(t, x') dx' \quad (1.5)$$

der beiden Veränderlichen t und x gebracht werden. Alternativ kann die obige Gleichung auch für $t_Q(x)$ in der Form

$$Q(t_Q(x), x) = Q = \text{const}$$

gelöst werden. Es gilt

$$Q(t_Q(x_Q(t)), x_Q(t)) = Q$$

und damit

$$t_Q(x_Q(t)) = t$$

d. h. $t_Q(x)$ ist die Umkehrfunktion von $x_Q(t)$. Die Funktion $t_Q(x)$ beschreibt die Ankunftszeit des Quantils am Ort x .

Mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung (1.2) gilt für (1.5)

$$\begin{aligned} Q(t, x) &= \int_x^{\infty} \int_{-\infty}^t \frac{\partial \varrho(t', x')}{\partial t'} dt' dx' = \int_{-\infty}^t \int_x^{\infty} \left(-\frac{\partial j(t', x')}{\partial x'} \right) dx' dt' \\ &= \int_{-\infty}^t j(t', x) dt' \quad . \end{aligned}$$

In dieser Formulierung ist $Q(t, x)$ die Menge bzw. der Bruchteil der physikalischen Größe G (z. B. der Wahrscheinlichkeit), die in der Zeit zwischen $-\infty$ und t durch den Punkt x geflossen ist. Ferner stellt sich die Funktion $Q(t, x)$ als das Hertzsche Potential der Stromdichte $j(t, x)$ und der Ladungsdichte $\varrho(t, x)$ heraus:

$$-\frac{\partial Q(t, x)}{\partial x} = \varrho(t, x) \quad , \quad \frac{\partial Q(t, x)}{\partial t} = j(t, x) \quad .$$

Wegen der Invarianzbedingung

$$Q(t_Q(x), x) = Q = \text{const}$$

gelten die Beziehungen

$$Q_1 = Q(t_Q(x_1), x_1) = Q(t_Q(x_2), x_2) = Q_2$$

und

$$\frac{dQ(t_Q(x), x)}{dx} = 0 \quad ,$$

d. h.

$$j(t_Q(x), x) \frac{dt_Q(x)}{dx} - \varrho(t_Q(x), x) = 0 \quad \text{oder} \quad v(t_Q(x), x) \frac{dt_Q(x)}{dx} = 1 \quad .$$

Die erste der beiden Beziehungen besagt, daß die in der Zeit $-\infty < t < t_Q(x_1)$ durch den Punkt x_1 geflossene Menge bzw. der Bruchteil der Größe G (z. B. einer Wahrscheinlichkeit) gleich der in der Zeit $-\infty < t < t_Q(x_2)$ durch den Punkt x_2 geflossenen ist. Diese Beziehungen für das Hertzsche Potential der Stromdichte $j(t, x)$ besitzen eine unmittelbare Verallgemeinerung auf den Fall von 3 Raumdimensionen.

1.1.1 Quantiltrajektorie

Für die Berechnung der Quantiltrajektorie $x_Q(t)$ wählen wir als Anfangsbedingung

$$x_Q(t^{\text{in}}) = x^{\text{in}} \quad .$$

Damit erhalten wir als Lösung der Bewegungsgleichung für die Quantiltrajektorie $x_Q(t)$ die Funktion

$$x_Q = x_Q(t, x^{\text{in}}) \quad ,$$

in der der Anfangsort x^{in} explizit als zweites Argument angegeben ist. Es gilt

$$x_Q(t^{\text{in}}, x^{\text{in}}) = x^{\text{in}} \quad .$$

Mit Hilfe der Quantiltrajektorie $x_Q(t, x^{\text{in}})$ kann die Invarianzbedingung (1.1) auf die Integration über die Anfangswerte zurückgeführt werden. Wir wählen die Substitution $x' = x_Q(t, x^{\text{in}})$ und erhalten

$$Q = \int_{x_Q(t)}^{\infty} \varrho(t, x') dx' = \int_{x^{\text{in}}}^{\infty} \varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}})) \frac{\partial x_Q(t, x^{\text{in}})}{\partial x^{\text{in}}} dx^{\text{in}} \quad .$$

Die Zeitunabhängigkeit der Größe Q für beliebige x^{in} führt dann auf

$$\frac{d}{dt} \left\{ \varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}})) \frac{\partial x_Q(t, x^{\text{in}})}{\partial x^{\text{in}}} \right\} = 0 \quad . \quad (1.6)$$

Ferner gilt für die totale Zeitabhängigkeit der „eindimensionalen Jacobi-Determinante“ der Substitution $x' = x_Q(t, x^{\text{in}})$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial x_Q(t, x^{\text{in}})}{\partial x^{\text{in}}} = \frac{\partial}{\partial x^{\text{in}}} \frac{dx_Q(t, x^{\text{in}})}{dt} = \frac{\partial}{\partial x^{\text{in}}} v(t, x_Q(t, x^{\text{in}})) \quad .$$

1.1.2 Transport-Invariante

Mit der Definition (1.4) des Geschwindigkeitsfeldes $v(t, x)$ stellt sich die Stromdichte als Produkt

$$j(t, x) = \varrho(t, x)v(t, x)$$

dar. Die Ortsableitung des Stromes ist dann

$$\frac{\partial j(t, x)}{\partial x} = \frac{\partial \varrho(t, x)}{\partial x} v(t, x) + \varrho(t, x) \frac{\partial v(t, x)}{\partial x} \quad .$$

Für das Quantil $x_Q(t)$ gilt dann

$$\frac{\partial j(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{\partial x} = \frac{\partial \varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{\partial x} \frac{dx_Q(t, x^{\text{in}})}{dt} + \varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}})) \frac{\partial v(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{\partial x}$$

wegen (1.3). Für die totale Zeitableitung der Dichte der Größe G folgt

$$\frac{d\varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{dt} = \frac{\partial \varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{\partial t} + \frac{\partial \varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{\partial x} \frac{dx_Q(t, x^{\text{in}})}{dt}$$

und mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung

$$\begin{aligned} \frac{d\varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{dt} &= -\frac{\partial j(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{\partial x} + \frac{\partial \varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{\partial x} v(t, x_Q(t, x^{\text{in}})) \\ &= -\varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}})) \frac{\partial v(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{\partial x} \quad . \end{aligned}$$

Für das Produkt $\varrho \partial x_Q / \partial x^{\text{in}}$ erhalten wir damit auch direkt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left\{ \varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}})) \frac{\partial x_Q(t, x^{\text{in}})}{\partial x^{\text{in}}} \right\} &= \\ &= \frac{d\varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{dt} \frac{\partial x_Q(t, x^{\text{in}})}{\partial x^{\text{in}}} + \varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}})) \frac{d}{dt} \frac{\partial x_Q(t, x^{\text{in}})}{\partial x^{\text{in}}} \\ &= -\varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}})) \frac{\partial v(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{\partial x} \frac{\partial x_Q(t, x^{\text{in}})}{\partial x^{\text{in}}} + \varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}})) \frac{\partial v(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{\partial x^{\text{in}}} \\ &= -\varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}})) \frac{\partial v(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{\partial x^{\text{in}}} + \varrho(t, x_Q(t, x^{\text{in}})) \frac{\partial v(t, x_Q(t, x^{\text{in}}))}{\partial x^{\text{in}}} = 0 \end{aligned}$$

in Übereinstimmung mit (1.6).

Die Zeitunabhängigkeit des Produkts $\varrho(t, x_Q) \partial x_Q(t, x^{\text{in}}) / \partial x^{\text{in}}$ findet ihre Verallgemeinerung in Systemen mit einer größeren Zahl von Variablen.

1.2 Quasi-eindimensionale Behandlung räumlicher Dichten

Dichten in mehreren Dimensionen können durch Integration auf eine Dimension reduziert werden. Durch die Wahl geeigneter Koordinaten wird eine separierende Fläche zwischen zwei disjunkten Raumbereichen durch die verbleibende, freie Koordinate charakterisiert. Damit werden quasi-eindimensionale zeitabhängige Dichten und Ströme gebildet, mit denen eine Bewegung der freien Koordinate auf ihrem Definitionsbereich beschrieben werden kann.

1.2.1 Ebenen: Lateral integrierte Dichten

Die Punkte einer Ebene können durch kartesische Koordinaten parametrisiert werden, wobei $s = s_0$ die Koordinate entlang eines Einheitsvektors \hat{n} sei, der auch den Normalenvektor der Ebene bilde, und s_1, s_2 orthogonale Koordinaten in der Ebene seien. Die Menge Q einer Größe G , die sich auf einer Seite des Raumes befindet, ist gegeben durch

$$\int_{s_Q}^{\infty} ds \varrho_s(t, s) = Q \quad , \quad \varrho_s(t, s) = \int_{-\infty}^{\infty} ds_1 \int_{-\infty}^{\infty} ds_2 \varrho(t, \vec{r}) \quad . \quad (1.7)$$

Dabei bildet $\varrho_s(t, s)$ die über die Ebene (lateral) integrierte Dichte.

Aus der zugrundeliegenden Kontinuitätsgleichung für $\varrho(t, \vec{r})$ und $\vec{j}(t, \vec{r})$ folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varrho_s(t, s)}{\partial t} &= \int_{-\infty}^{\infty} ds_1 \int_{-\infty}^{\infty} ds_2 \frac{\partial \varrho(t, \vec{r})}{\partial t} = - \int_{-\infty}^{\infty} ds_1 \int_{-\infty}^{\infty} ds_2 \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(t, \vec{r}) \\ &= - \frac{\partial}{\partial s} \int_{-\infty}^{\infty} ds_1 \int_{-\infty}^{\infty} ds_2 j_{\hat{n}}(t, \vec{r}) - \int_{-\infty}^{\infty} ds_1 \int_{-\infty}^{\infty} ds_2 \left(\frac{\partial j_{s_1}(t, \vec{r})}{\partial s_1} + \frac{\partial j_{s_2}(t, \vec{r})}{\partial s_2} \right) \quad , \end{aligned}$$

wobei $j_{\hat{n}}(t, \vec{r}) = \hat{n} \cdot \vec{j}(t, \vec{r})$ ist und j_{s_i} , $i = 1, 2$, die entsprechenden Projektionen von \vec{j} auf die Koordinatenachsen in der Ebene bezeichnet. Die letzten beiden Terme – jeweils nach einer Koordinate integriert – verschwinden, wenn $\vec{j}(t, \vec{r})$ hinreichend schnell abfällt. Der erste Integralausdruck wird entsprechend der Dichte in (1.7) mit $j_s(t, s)$ bezeichnet, und es ergibt sich die (eindimensionale) Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \varrho_s(t, s)}{\partial t} + \frac{\partial j_s(t, s)}{\partial s} = 0 \quad .$$

Die Konstanz des Integralausdrucks in (1.7) führt wie in Abschnitt 1.1 zu einer Differentialgleichung für das Quantil s_Q mit einem (eindimensionalen) Geschwindigkeitsfeld $v_s(t, s)$,

$$\frac{ds_Q}{dt} = v_s(t, s_Q) \quad , \quad v_s(t, s) = \frac{j_s(t, s)}{\varrho_s(t, s)} \quad .$$

In [15, 16, 24] wurde mit diesem Ansatz der Energietransport in Ausbreitungsrichtung elektromagnetischer Wellen in Hohlleitern untersucht.

1.2.2 Kugelflächen: Sphärisch integrierte Dichten

Für konzentrische Kugelflächen kann man die Menge Q einer Größe G außerhalb solcher Flächen betrachten. Unter Einführung einer radialen Dichte $\varrho_r(t, r)$ durch Integration über den gesamten Raumwinkel Ω ergibt sich

$$\int_{r_Q}^{\infty} dr \varrho_r(t, r) = Q \quad , \quad \varrho_r(t, r) = r^2 \int_{\Omega} d\Omega \varrho(t, \vec{r}) \quad . \quad (1.8)$$

Zeitliche Differentiation und Verwendung der zugrundeliegenden Kontinuitätsgleichung und der Divergenz in Kugelkoordinaten [34, 7] liefert

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varrho_r(t, r)}{\partial t} &= r^2 \int_{\Omega} d\Omega \frac{\partial \varrho(t, \vec{r})}{\partial t} = -r^2 \int_{\Omega} d\Omega \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(t, \vec{r}) \\ &= -\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \int_{\Omega} d\Omega j_{\vec{r}}(t, \vec{r}) \right) - r \int_{\Omega} d\vartheta d\varphi \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} (\sin \vartheta j_{\vartheta}(t, \vec{r})) + \frac{\partial}{\partial \varphi} j_{\varphi}(t, \vec{r}) \right) \quad . \end{aligned}$$

Die Integralausdrücke über die Winkelanteile verschwinden nach Integration über jeweils eine Variable, einerseits wegen des Faktors $\sin \vartheta$ in der Polarkomponente und andererseits wegen der Differenz der Azimutalkomponente am gleichen Raumpunkt. Mit der Einführung des Symbols $j_r(t, r)$ entsprechend (1.8) erhält man die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \varrho_r(t, r)}{\partial t} + \frac{\partial j_r(t, r)}{\partial r} = 0 \quad .$$

Hier führt die Konstanz des Integralausdrucks in (1.8) wie in Abschnitt 1.1 entsprechend zu einer Differentialgleichung für das Quantil r_Q mit einem (eindimensionalen) Geschwindigkeitsfeld $v_r(t, r)$,

$$\frac{dr_Q}{dt} = v_r(t, r_Q) \quad , \quad v_r(t, r) = \frac{j_r(t, r)}{\varrho_r(t, r)} \quad .$$

1.3 Allgemeine Definition des Quantils

In Abschnitt 1.2 wurden einfache Beispiele von möglichen Detektorflächen in drei Dimensionen beschrieben, deren Flächenpunkte durch die Nebenbedingung der Äquidistanz von einem (ggf. uneigentlichen) Raumpunkt gegeben sind und so die Beschreibung durch eine lineare Koordinate erlauben. In diesem Abschnitt werden nun allgemeine Flächen behandelt, deren zeitliches Verhalten von der lokalen Strömung der physikalischen Größe bestimmt wird.

1.3.1 Die Invarianzbedingung

Wir definieren durch zeitliche Integration

$$\vec{I}(t, \vec{r}) = \int_{-\infty}^t \vec{j}(t', \vec{r}) dt' \quad (1.9)$$

den Hertzschen Vektor [55, 7] der Stromdichte $\vec{j}(t, \vec{r})$. Es gilt

$$\vec{j}(t, \vec{r}) = \frac{\partial}{\partial t} \vec{I}(t, \vec{r}) \quad .$$

Mit der Festlegung

$$\varrho(t, \vec{r}) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{I}(t, \vec{r})$$

gilt die Kontinuitätsgleichung für ϱ und \vec{j} . Das Zeitintegral $\vec{I}(t, \vec{r})$ der Stromdichte $\vec{j}(t, \vec{r})$ einer physikalischen Größe G beschreibt die bis zur Zeit t pro Flächeneinheit durchgeflossene Menge der Größe G .

Die Funktion $t(\vec{r})$ bezeichne die ortsabhängige Ankunftszeit eines Signals. Das Zeitintegral

$$\int_{-\infty}^{t(\vec{r})} \vec{j}(t', \vec{r}) dt' = \vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r}) \quad (1.10)$$

beschreibt die durch den Ort \vec{r} im Zeitintervall $-\infty < t' < t(\vec{r})$ durchgeflossene Menge $\vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r})$ pro Flächeneinheit der Größe G . Das Oberflächenintegral

$$Q_S = \iint_S \vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r}) \cdot d^2\vec{a} = \iint_S \int_{-\infty}^{t(\vec{r})} \vec{j}(t', \vec{r}) dt' \cdot d^2\vec{a}$$

beschreibt die Menge Q_S der Größe G , die durch das Flächenstück S zwischen den Zeiten $-\infty$ und der dem Ort \vec{r} zugeordneten Ankunftszeit $t(\vec{r})$ geflossen ist.

Wir wählen ein beliebiges Volumen V , dessen Oberfläche (V) die Vereinigung der beiden Teilflächen S_1 und S_2 mit gemeinsamer Randkurve sei,

$$(V) = S_1 \cup S_2 \quad , \quad (S_1) = (S_2) \quad . \quad (1.11)$$

Die Normalen auf den beiden Teilflächen seien bezüglich V äußere Normalen. Die Forderung

$$Q_2 = \iint_{S_2} \vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r}) \cdot d^2\vec{a} = - \iint_{S_1} \vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r}) \cdot d^2\vec{a} = Q_1 \quad (1.12)$$

besagt, daß die durch die Orte $\vec{r} \in S_2$ auf dieser Fläche bis zur Ankunftszeit $t(\vec{r})$ durchgeflossene Menge Q_2 der Größe G gleich der entsprechenden Menge durch die Fläche S_1 ist. Diese Forderung ist nahegelegt durch die Vorstellung eines Detektors, der die durch seine Eintrittsfläche S_1 bis zu einer Zeit $t(\vec{r})$ durchgeflossene Menge der Größe G feststellt. Bei Erreichen einer Schwellenmenge Q_1 stellt der Detektor die Ankunft des Signals fest. Da die Größen und Formen wie die Orte der Eintrittsflächen S beliebig gewählt werden können, müssen die Ankunftszeiten ortsabhängig sein.

Die Ankunftszeit $t(\vec{r})$ wird durch (1.12) gerade so festgelegt, daß die Menge Q_S , die bis zu den Zeitpunkten $t(\vec{r})$ durch die Fläche S mit der gleichen Randkurve (S) getreten ist, für alle Flächen mit dieser Randkurve die gleiche ist.

Die Bedingung (1.12) führt wegen (1.11) direkt auf das geschlossene Oberflächenintegral

$$\iint_{(V)} \vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r}) \cdot d^2\vec{a} = 0 \quad .$$

Es gilt mit dem Satz von Gauß

$$\iiint_V \vec{\nabla} \cdot \vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r}) d^3\vec{r} = 0$$

und daher

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r}) = 0 \quad . \quad (1.13)$$

Damit kann $\vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r})$ als Rotation eines Vektorpotentials $\vec{K}(\vec{r})$ durch

$$\vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r}) = \vec{\nabla} \times \vec{K}(\vec{r})$$

dargestellt werden. Diese Darstellung erlaubt die Formulierung

$$Q_S = \iint_S \vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r}) \cdot d^2\vec{a} = \iint_S (\vec{\nabla} \times \vec{K}(\vec{r})) \cdot d^2\vec{a} = \int_{(S)} \vec{K}(\vec{r}) \cdot d\vec{r} \quad ,$$

die zeigt, daß der Durchfluß Q_S nur vom Rand (S) des Flächenstücks S abhängt.

1.3.2 Krummlinige Koordinaten

Wir führen zunächst allgemeine krummlinige Koordinaten $\underline{u} = (u_0, u_1, u_2)$ ein mit Hilfe der Abbildung

$$\vec{r}(\underline{u}) = \vec{r}(u_0, \underline{u}) \quad , \quad \underline{u} = (u_1, u_2) \quad . \quad (1.14)$$

(Die Aufspaltung der Parameter ergibt sich aus der späteren Verwendung von u_0 als Kurvenparameter und $\underline{u} = (u_1, u_2)$ als Flächenparameter.) Als lokales System von Basisvektoren wählen wir

$$\vec{\eta}^i(u_0, \underline{u}) = \frac{\partial \vec{r}}{\partial u_i}(u_0, \underline{u}) \quad , \quad i = 0, 1, 2 \quad , \quad (1.15)$$

und führen die duale Basis

$$\vec{\eta}_i(u_0, \underline{u}) = \vec{\eta}^j(u_0, \underline{u}) \times \vec{\eta}^k(u_0, \underline{u}) \quad , \quad i, j, k \text{ zyklisch} \quad ,$$

ein. Mit der Jacobi-Determinante

$$\begin{aligned} D(u_0, \underline{u}) &= \vec{\eta}^i(u_0, \underline{u}) \cdot \vec{\eta}_i(u_0, \underline{u}) \\ &= \vec{\eta}^i(u_0, \underline{u}) \cdot (\vec{\eta}^j(u_0, \underline{u}) \times \vec{\eta}^k(u_0, \underline{u})) \quad , \quad i, j, k \text{ zyklisch} \quad , \end{aligned}$$

ergeben sich die Orthogonalitätsrelationen

$$\vec{\eta}^i(u_0, \underline{u}) \cdot \vec{\eta}_j(u_0, \underline{u}) = D(u_0, \underline{u}) \delta_j^i \quad , \quad (1.16)$$

wobei δ_j^i das Kronecker-Symbol bezeichnet, und die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{i=0}^2 \vec{\eta}^i(u_0, \underline{u}) \otimes \vec{\eta}_i(u_0, \underline{u}) = \sum_{i=0}^2 \vec{\eta}_i(u_0, \underline{u}) \otimes \vec{\eta}^i(u_0, \underline{u}) = D(u_0, \underline{u}) \underline{\underline{1}} \quad . \quad (1.17)$$

In diesen krummlinigen Koordinaten u_0, u_1, u_2 schreibt sich der Operator der totalen Differentiation als

$$d = \sum_{i=0}^2 du_i \frac{\partial}{\partial u_i} \quad ,$$

und damit ist das Differential des Ortsvektors gegeben durch

$$d\vec{r} = \sum_{i=0}^2 \frac{\partial \vec{r}}{\partial u_i} du_i = \sum_{i=0}^2 \vec{\eta}^i du_i \quad .$$

Daher kann das totale Differential auch geschrieben werden als

$$d = \sum_{i,j=0}^2 du_i \delta_j^i \frac{\partial}{\partial u_j} = \frac{1}{D(u_0, \underline{u})} \sum_{i,j=0}^2 du_i \vec{\eta}^i \cdot \vec{\eta}_j \frac{\partial}{\partial u_j} \quad .$$

Mit dem Gradienten-Operator $\vec{\nabla}$,

$$\vec{\nabla} = \frac{1}{D(u_0, \underline{u})} \sum_{i=0}^2 \vec{\eta}_i(u_0, \underline{u}) \frac{\partial}{\partial u_i} \quad , \quad (1.18)$$

gilt dann

$$d = d\vec{r} \cdot \vec{\nabla} \quad .$$

Für die Ableitung der Jacobi-Determinante D nach den Parametern u_k ergibt sich

$$\frac{\partial D(u_0, \underline{u})}{\partial u_k} = \sum_{i=0}^2 \frac{\partial \vec{\eta}^i}{\partial u_k} \cdot \vec{\eta}_i$$

wegen der zyklischen Vertauschbarkeit der Faktoren in D , des weiteren gilt

$$\frac{\partial}{\partial u_k} \vec{\eta}^i = \frac{\partial}{\partial u_k} \frac{\partial}{\partial u_i} \vec{r}(u_0, \underline{u}) = \frac{\partial}{\partial u_i} \frac{\partial}{\partial u_k} \vec{r}(u_0, \underline{u}) = \frac{\partial}{\partial u_i} \vec{\eta}^k$$

und somit

$$\frac{\partial D(u_0, \underline{u})}{\partial u_k} = \sum_{i=0}^2 \frac{\partial \vec{\eta}^k}{\partial u_i} \cdot \vec{\eta}_i = D(u_0, \underline{u}) \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{\eta}^k(u_0, \underline{u}) \right) \quad . \quad (1.19)$$

Aus (1.14) lassen sich die Umkehrfunktionen

$$u_{\vec{r}_i} = u_{\vec{r}_i}(\vec{r}) \quad , \quad i = 0, 1, 2 \quad ,$$

als Lösungen der Gleichungen

$$\vec{r}(\underline{u}_{\vec{r}}(\vec{r})) = \vec{r}$$

gewinnen. Es gilt

$$u_{\vec{r}i}(\vec{r}(\underline{u})) = u_i \quad , \quad i = 0, 1, 2 \quad . \quad (1.20)$$

Durch Differentiation nach \vec{r} findet man

$$\underline{\underline{1}} = \vec{\nabla} \otimes \vec{r} = \sum_{i=0}^2 \vec{\nabla} u_{\vec{r}i}(\vec{r}) \otimes \frac{\partial \vec{r}(\underline{u})}{\partial u_i} \quad .$$

Mit (1.15) folgt

$$\sum_{i=0}^2 \vec{\nabla} u_{\vec{r}i}(\vec{r}) \otimes \vec{\eta}^i(\vec{r}) = \underline{\underline{1}} \quad .$$

Die drei Vektoren $\vec{\nabla} u_{\vec{r}i}(\vec{r})$, $i = 0, 1, 2$, bilden die normierte duale Basis der $\vec{\eta}^i(\vec{r})$, und daher gilt durch Vergleich mit (1.17)

$$D(\underline{u}) \vec{\nabla} u_{\vec{r}i}(\vec{r}) = \vec{\eta}_i(\underline{u}) \quad . \quad (1.21)$$

Die Relation (1.20) liefert durch Differentiation nach u_j die Orthonormalitätsrelationen

$$\delta_i^j = \frac{\partial}{\partial u_j} u_{\vec{r}i}(\vec{r}(\underline{u})) = \frac{\partial \vec{r}(\underline{u})}{\partial u_j} \cdot \vec{\nabla} u_{\vec{r}i}(\vec{r}(\underline{u})) = \vec{\eta}^j(\underline{u}) \cdot \vec{\nabla} u_{\vec{r}i}(\vec{r}) \quad .$$

1.3.3 Zeitabhängige krummlinige Koordinaten

Aufbauend auf die Darstellungen in Abschnitt 1.3.2 führen wir hier zeitabhängige krummlinige Koordinaten $\underline{u} = (u_0, u_1, u_2)$ ein mit Hilfe der Abbildung

$$\vec{r} = \vec{r}(t, t_i, \vec{x}(\underline{u})) = \vec{r}(t, \underline{u}) \quad \text{mit} \quad \vec{r}(t_i, t_i, \vec{x}(\underline{u})) = \vec{x}(\underline{u}) \quad .$$

Da die Zeit hier lediglich ein äußerer Parameter ist, gelten die sich auf die Koordinaten u_0, u_1, u_2 beziehenden Relationen weiterhin, also die Konstruktion der Basisvektoren, hier $\vec{\eta}^i(t, \underline{u})$ genannt, die Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsrelation(en) wie die Bildung des Gradienten-Operators $\vec{\nabla}$.

Für die Zeitableitung der Basisvektoren erhält man

$$\frac{\partial \vec{\eta}^i}{\partial t}(t, \underline{u}) = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \vec{r}}{\partial u_i}(t, \underline{u}) = \frac{\partial}{\partial u_i} \frac{\partial \vec{r}}{\partial t}(t, \underline{u}) = \frac{\partial}{\partial u_i} \vec{v}(t, \vec{r}(t, \underline{u})) \quad , \quad (1.22)$$

und die Zeitableitung der Jacobi-Determinante nimmt die Form

$$\left(\frac{dD}{dt} \right)_{\underline{u}}(t, \underline{u}) = \sum_{i=0}^2 \frac{\partial \vec{\eta}^i}{\partial t} \cdot \vec{\eta}_i$$

an. Zusammen mit (1.22) erhält man

$$\begin{aligned} \left(\frac{dD}{dt}\right)_{\underline{u}}(t, \underline{u}) &= \sum_{i=0}^2 \vec{\eta}_i \cdot \frac{\partial \vec{v}}{\partial u_i}(t, \vec{r}(t, \underline{u})) = D(t, \underline{u}) \vec{\nabla} \cdot \vec{v}(t, \vec{r}(t, \underline{u})) \\ &= D(t, \underline{u}) \vec{\nabla} \cdot \vec{v}(t, \vec{r}(t, t_i, \vec{x}(\underline{u}))) \quad . \end{aligned} \quad (1.23)$$

Die relative zeitliche Änderung der Jacobi-Determinante ist damit gleich der Divergenz des Geschwindigkeitsfeldes $\vec{v}(t, \vec{r}(t, \underline{u}))$ am Ort $\vec{r}(t, \underline{u})$.

1.3.4 Transport-Invariante

Die Transport-Invariante (1.6) besitzt eine dreidimensionale Verallgemeinerung,

$$\frac{d}{dt} \left\{ \varrho(t, \vec{r}(t, \underline{u})) D(t, \underline{u}) \right\} = 0 \quad .$$

Der Beweis folgt dem Vorgehen in Abschnitt 1.1.2. Mit der Faktorisierung

$$\vec{j}(t, \vec{r}) = \varrho(t, \vec{r}) \vec{v}(t, \vec{r})$$

nimmt die Kontinuitätsgleichung die Gestalt

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varrho(t, \vec{r}(t))}{\partial t} &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(t, \vec{r}(t)) = -\vec{\nabla} \cdot (\varrho(t, \vec{r}(t)) \vec{v}(t, \vec{r}(t))) \\ &= -\vec{v}(t, \vec{r}(t)) \cdot \vec{\nabla} \varrho(t, \vec{r}(t)) - \varrho(t, \vec{r}(t)) \vec{\nabla} \cdot \vec{v}(t, \vec{r}(t)) \end{aligned}$$

an. Für die totale Zeitableitung folgt

$$\frac{d\varrho(t, \vec{r}(t))}{dt} = -\varrho(t, \vec{r}(t)) \vec{\nabla} \cdot \vec{v}(t, \vec{r}(t)) \quad .$$

Wegen (1.23) ist damit das Produkt $\varrho(t, \vec{r}(t, \underline{u})) D(t, \underline{u})$ zeitunabhängig,

$$\frac{d}{dt} \left\{ \varrho(t, \vec{r}(t, \underline{u})) D(t, \underline{u}) \right\} = 0 \quad .$$

1.3.5 Differentialgleichung für die Ankunftszeitfunktion

Die Gleichung (1.13), die das Verschwinden der Divergenz der Funktion $\vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r})$ ausdrückt, erlaubt die Herleitung der quasilinearen partiellen Differentialgleichung erster Ordnung

$$\vec{j}(t(\vec{r}), \vec{r}) \cdot \vec{\nabla} t(\vec{r}) - \varrho(t(\vec{r}), \vec{r}) = 0 \quad .$$

Durch Einführung des Geschwindigkeitsfeldes

$$\vec{v}(t, \vec{r}) = \frac{\vec{j}(t, \vec{r})}{\varrho(t, \vec{r})} \quad (1.24)$$

geht diese Gleichung in

$$\vec{v}(t(\vec{r}), \vec{r}) \cdot \vec{\nabla} t(\vec{r}) = 1 \quad (1.25)$$

über. Als Anfangsbedingungen sei die Ankunftszeitfunktion $t(\vec{r})$ auf einer Fläche $\vec{r}^{\text{in}}(\underline{u})$, die durch zwei Parameter $\underline{u} = (u_1, u_2)$ beschrieben wird,

$$t(\vec{r}^{\text{in}}(\underline{u})) = t^{\text{in}}(\underline{u}) \quad ,$$

vorgegeben.

Die Lösung der partiellen Differentialgleichung (1.25) erfolgt mit der Hamilton–Jacobi-Methode der Charakteristiken [13]. Letztere sind definiert durch die Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$\frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \vec{v}(t, \vec{r}(t)) \quad (1.26)$$

mit den Anfangsbedingungen

$$\vec{r}(t^{\text{in}}(\underline{u})) = \vec{r}^{\text{in}}(\underline{u}) \quad , \quad (1.27)$$

die die Anfangsposition $\vec{r}(t^{\text{in}}(\underline{u}))$ zur Zeit $t^{\text{in}}(\underline{u})$ mit einem der Punkte $\vec{r}^{\text{in}}(\underline{u})$, d. h. für festes $\underline{u} = (u_1, u_2)$, identifiziert. Für jedes Parameterpaar $\underline{u} = (u_1, u_2)$ erhalten wir eine Trajektorie der Schar der Charakteristiken

$$\vec{r}_c(t, \underline{u}) = \vec{r}(t, \underline{u}) = \vec{r}(t, \vec{r}^{\text{in}}(\underline{u})) \quad (1.28)$$

mit der Anfangsbedingung

$$\vec{r}_c(t^{\text{in}}(\underline{u}), \underline{u}) = \vec{r}(t^{\text{in}}(\underline{u}), \vec{r}^{\text{in}}(\underline{u})) = \vec{r}^{\text{in}}(\underline{u}) \quad .$$

Jede Trajektorie ist Lösung der Hamiltonschen Differentialgleichung (1.26). Durch Umkehrung der Funktion $\vec{r}_c(t, \underline{u})$ nach den Parametern erhalten wir

$$t = t_{\vec{r}}(\vec{r}) \quad , \quad \underline{u} = \underline{u}_{\vec{r}}(\vec{r})$$

als Lösung der Gleichung

$$\vec{r}_c(t_{\vec{r}}(\vec{r}), \underline{u}_{\vec{r}}(\vec{r})) = \vec{r} \quad .$$

Insbesondere gilt

$$t_{\vec{r}}(\vec{r}^{\text{in}}(\underline{u})) = t^{\text{in}}(\underline{u}) \quad , \quad \underline{u}_{\vec{r}}(\vec{r}^{\text{in}}(\underline{u})) = \underline{u}$$

und

$$t_{\vec{r}}(\vec{r}_c(t, \underline{u})) = t \quad , \quad \underline{u}_{\vec{r}}(\vec{r}_c(t, \underline{u})) = \underline{u} \quad . \quad (1.29)$$

Durch totale Zeitableitung erhalten wir aus (1.29)

$$1 = \frac{dt}{dt} = \frac{d}{dt} t_{\vec{r}}(\vec{r}_c(t, \underline{u})) = \frac{d\vec{r}_c(t, \underline{u})}{dt} \cdot \vec{\nabla} t_{\vec{r}}(\vec{r}_c(t, \underline{u}))$$

und damit

$$\vec{v}(t, \vec{r}) \cdot \vec{\nabla} t(\vec{r}) = 1 \quad .$$

Damit folgt, daß die Umkehrfunktion der Charakteristiken,

$$t_{\vec{r}} = t_{\vec{r}}(\vec{r}) \quad ,$$

die partielle Differentialgleichung (1.25) erfüllt. Die Bohmschen Bahnen [3, 4], vgl. auch Abschnitt A.4, als Lösungen von (1.26) im Fall der nichtrelativistischen Quantenmechanik stellen sich so als die Charakteristiken der partiellen Differentialgleichung (1.25) heraus.

1.3.6 Geometrische Konstruktion

Durch die Charakteristiken (1.28) der Lösung zu (1.13) aus Abschnitt 1.3.5 bereits ergibt sich eine Endfläche S_2 aus der Anfangsfläche S_1 . Es stellt sich nun die Frage, welche Größen entlang welcher Kurven zwischen Anfangs- und Endfläche konstant bleiben (sollen).

Im folgenden werden zur Unterscheidung der auf der integrierten Stromdichte basierenden krummlinigen Koordinaten von den vorher verwendeten die Ortsvektoren mit $\vec{\ell}$, die Basisvektoren mit $\vec{\lambda}^i$, die Jacobi-Determinante mit Λ und die Parameter mit s bzw. \underline{s} bezeichnet. Nach Abschnitt 1.3.2 bestimmt sich der Normalenvektor der Fläche an einem Raumpunkt $\vec{\ell}(s, \underline{s})$ bereits aus dem Kreuzprodukt der Flächen-Tangentialvektoren, $\vec{\lambda}^1 \times \vec{\lambda}^2 = \vec{\lambda}_0$, also dem nullten dualen Vektor. Aus dem Skalarprodukt der integrierten Stromdichte \vec{I} mit $\vec{\lambda}_0$ ergibt sich als (im allgemeinen flächenparameterabhängige) unskalierte Größe

$$q_{\text{us}}(s, \underline{s}) = \vec{I}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \cdot \vec{\lambda}_0(s, \underline{s}) \quad , \quad (1.30)$$

deren Invarianz – nach eventueller geeigneter Skalierung – entlang der Kurven des Parameters s bei festen Flächenparametern \underline{s} gefordert wird.

Zur näheren Bestimmung der invarianten Größe gehen wir von Gleichung (1.13) aus und verwenden den Gradienten-Operator (1.18) in krummlinigen Koordinaten sowie die (allgemeine) Zerlegung $\vec{I} = \sum_{k=0}^2 (\vec{I} \cdot \vec{\lambda}_k) \vec{\lambda}^k / \Lambda(s, \underline{s})$,

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{I} &= \frac{1}{\Lambda(s, \underline{s})} \sum_{k=0}^2 \vec{\lambda}_k \frac{\partial}{\partial s_k} \cdot \left(\frac{1}{\Lambda(s, \underline{s})} \sum_{l=0}^2 (\vec{I} \cdot \vec{\lambda}_l) \vec{\lambda}^l \right) \\ &= \frac{1}{\Lambda^2(s, \underline{s})} \sum_{k,l=0}^2 \vec{\lambda}_k \cdot \left(\frac{\partial (\vec{I} \cdot \vec{\lambda}_l)}{\partial s_k} \vec{\lambda}^l + (\vec{I} \cdot \vec{\lambda}_l) \frac{\partial \vec{\lambda}^l}{\partial s_k} - \frac{(\vec{I} \cdot \vec{\lambda}_l) \vec{\lambda}^l}{\Lambda(s, \underline{s})} \frac{\partial \Lambda(s, \underline{s})}{\partial s_k} \right) \\ &= \frac{1}{\Lambda^2(s, \underline{s})} \left(\sum_{l=0}^2 \Lambda(s, \underline{s}) \frac{\partial (\vec{I} \cdot \vec{\lambda}_l)}{\partial s_l} + \sum_{k,l=0}^2 \vec{\lambda}_k \cdot \frac{\partial \vec{\lambda}^l}{\partial s_k} (\vec{I} \cdot \vec{\lambda}_l) - \sum_{l=0}^2 (\vec{I} \cdot \vec{\lambda}_l) \frac{\partial \Lambda(s, \underline{s})}{\partial s_l} \right) , \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt für den ersten und dritten Term die Orthogonalitätsrelationen (1.16) ausgenutzt wurden. Mit (1.19) kann die Summe über k zugunsten der Ableitung von Λ nach s_l ersetzt werden, womit die letzten beiden Terme einander wegheben und sich

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{I} = \frac{1}{\Lambda(s, \underline{s})} \sum_{l=0}^2 \frac{\partial}{\partial s_l} (\vec{I} \cdot \vec{\lambda}_l(s, \underline{s})) \quad (1.31)$$

ergibt. Die Gleichung (1.13) mit dem Ausdruck (1.31) vereinfacht sich mit der Forderung

$$0 = \left(\frac{\partial q_{\text{us}}}{\partial s} \right)_{\underline{s}} = \frac{\partial}{\partial s} \left\{ \vec{I}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \cdot \vec{\lambda}_0(s, \underline{s}) \right\} \quad (1.32)$$

zu

$$0 = \vec{\nabla} \cdot \vec{I} = \frac{1}{\Lambda(s, \underline{s})} \sum_{l=1,2} \frac{\partial}{\partial s_l} (\vec{I} \cdot \vec{\lambda}_l(s, \underline{s})) \quad .$$

Sie ist durch die Wahl von $\vec{\lambda}^0(s, \underline{s})$ parallel zu $\vec{I}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s}))$, d. h.

$$\vec{I}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) = \frac{1}{\Lambda(s, \underline{s})} I_0(s, \underline{s}) \vec{\lambda}^0(s, \underline{s}) \quad (1.33)$$

mit

$$I_0(s, \underline{s}) = \vec{I}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \cdot \vec{\lambda}_0(s, \underline{s}) \quad , \quad (1.34)$$

erfüllt, da $\vec{\lambda}^0 \cdot \vec{\lambda}_l = 0$, $l = 1, 2$.

Der Skalierungsfaktor in (1.30) besteht folglich aus einer (koordinatenunabhängigen) Konstante, die zu Eins gesetzt werden kann, d. h.

$$q_{\text{u}}(s, \underline{s}) = q_{\text{us}}(s, \underline{s}) = q_{\text{u}}(\underline{s}) \quad . \quad (1.35)$$

Als Differentialgleichung für die Kurve, entlang der der Raumpunkt $\vec{\ell}(s, \underline{s})$ mit konstantem q_{u} läuft, ergibt sich

$$\vec{\lambda}^0 = \frac{\partial \vec{\ell}(s, \underline{s})}{\partial s} = \pm \hat{I}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \quad , \quad (1.36)$$

womit $\vec{\lambda}^0$ als Einheitsvektor und der Parameter $s_0 = s$ als Bogenlänge festgelegt wird. Die so definierten Kurven, die hier Detektorverbindungskurven genannt werden, bilden damit die Feldlinien des Feldes $\vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r})$. Der Raumpunkt $\vec{\ell}(s, \underline{s})$ übernimmt hier die Rolle des Quantils s in einer Dimension. Üblicherweise wird bei geeigneter Wahl der Orientierung der Anfangsfläche mit $\vec{I} \cdot \vec{\lambda}_0 > 0$ und $\vec{j} \cdot \vec{\lambda}_0 > 0$ das positive Vorzeichen gewählt, jedoch kann im Laufe der zeitlichen Entwicklung eine Umkehrung eintreten, vgl. Abschnitte 1.6 und 1.7. Das Vorzeichen in (1.36) ist z. B. mit dem von $\vec{j} \cdot \vec{\lambda}_0$ verknüpft.

1.3.7 Wahl der Flächen und der Parametrisierung

Wir betrachten die Anfangsfläche S^{in} gegeben durch

$$S^{\text{in}}(\vec{r}) = 0$$

mit der Lösung

$$\vec{r} = \vec{r}^{\text{in}}(\underline{s}) \quad .$$

Die zugehörige Ankunftszeitfunktion sei durch

$$t(\vec{r}^{\text{in}}(\underline{s})) = t^{\text{in}}$$

gegeben. Die Größe

$$q(\underline{s}) = \vec{I}(t^{\text{in}}, \vec{r}^{\text{in}}(\underline{s})) \cdot \vec{A}_0(\underline{s}) \quad , \quad \vec{A}_0(\underline{s}) = \frac{\partial \vec{r}^{\text{in}}(\underline{s})}{\partial s_1} \times \frac{\partial \vec{r}^{\text{in}}(\underline{s})}{\partial s_2} \quad ,$$

$\vec{A}_0(\underline{s}) = \vec{\lambda}_0(s^{\text{in}}, \underline{s})$, stellt den bezüglich der Parameter \underline{s} differentiellen bis zum Zeitpunkt t^{in} durch die Fläche S^{in} geflossenen Strom am Ort $\vec{r}^{\text{in}}(\underline{s})$ dar. Ist $q(\underline{s})$ auf der gesamten Anfangsfläche S^{in} nichtnegativ, so kann die Parametrisierung z. B. so gewählt werden, daß $q(\underline{s}) = q$ vom Ort $\vec{r}^{\text{in}}(\underline{s})$ auf dieser Fläche unabhängig ist. Allgemein kann aus Gründen der Zweckmäßigkeit die Parametrisierung gewechselt werden. Der Übergang zu anderen Parametern wird durch

$$\underline{s} = \underline{s}(\underline{\beta}) \quad , \quad \underline{\beta} = (\beta_1, \beta_2) \quad ,$$

erreicht. Das Flächenelement der Tangentialfläche an S^{in} ist durch

$$\vec{A}_0(\underline{s}) d^2 \underline{s} = \vec{B}_0(\underline{\beta}) d^2 \underline{\beta}$$

gegeben mit der Jacobi-Determinante der Transformation,

$$\vec{B}_0(\underline{\beta}) = \vec{A}_0(\underline{s}(\underline{\beta})) \left(\frac{\partial s_1}{\partial \beta_1} \frac{\partial s_2}{\partial \beta_2} - \frac{\partial s_1}{\partial \beta_2} \frac{\partial s_2}{\partial \beta_1} \right) \quad .$$

Damit ergibt sich der differentielle Strom bezüglich der Parameter $\underline{\beta}$ zu

$$\begin{aligned} q(\underline{\beta}) &= \vec{I}(t^{\text{in}}, \vec{r}^{\text{in}}(\underline{s}(\underline{\beta}))) \cdot \vec{B}_0(\underline{\beta}) \\ &= \vec{I}(t^{\text{in}}, \vec{r}^{\text{in}}(\underline{s}(\underline{\beta}))) \cdot \vec{A}_0(\underline{s}(\underline{\beta})) \left(\frac{\partial s_1}{\partial \beta_1} \frac{\partial s_2}{\partial \beta_2} - \frac{\partial s_1}{\partial \beta_2} \frac{\partial s_2}{\partial \beta_1} \right) \quad . \end{aligned}$$

Bei bestimmten Vorgaben an $q(\underline{\beta})$ und durch die Festlegung einer Transformationsfunktion, z. B. $s_1 = s_1(\underline{\beta})$, ergibt sich für die andere, hier $s_2 = s_2(\underline{\beta})$, eine quasilineare partielle Differentialgleichung erster Ordnung.

1.3.8 Konstruktion der invarianten Größen

Das in Abschnitt 1.3.6 definierte Quantil $\vec{\ell}$ stützt sich auf die Unabhängigkeit der Größe

$$\vec{I}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \cdot \vec{A}_0(s, \underline{s}) = q_u(\underline{s})$$

von s . Mit der Darstellung

$$\vec{A}_0(s, \underline{s}) = \vec{\lambda}_0(s, \underline{s}) \quad ,$$

$\vec{\lambda}^0 = \partial \vec{\ell} / \partial s$, und

$$\vec{I}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) = I(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \vec{\lambda}^0(s, \underline{s})$$

(vgl. (1.33)) erhält $q_u(\underline{s})$ die Gestalt

$$q_u(\underline{s}) = I(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \Lambda(s, \underline{s}) \quad .$$

Es gilt mit (1.13)

$$\begin{aligned} 0 &= \vec{\nabla} \cdot \vec{I}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \\ &= \vec{\lambda}^0(s, \underline{s}) \cdot \vec{\nabla} I(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) + I(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \vec{\nabla} \cdot \vec{\lambda}^0(s, \underline{s}) \end{aligned}$$

und daher

$$\frac{\partial}{\partial s} I(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) = -I(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \vec{\nabla} \cdot \vec{\lambda}^0(s, \underline{s}) \quad .$$

Ferner gilt nach (1.19)

$$\frac{\partial}{\partial s} \Lambda(s, \underline{s}) = \Lambda(s, \underline{s}) \vec{\nabla} \cdot \vec{\lambda}^0(s, \underline{s}) \quad .$$

Damit folgt insgesamt die behauptete Unabhängigkeit der Größe $q_u(\underline{s})$ von s auch direkt,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial s} q_u &= \frac{\partial}{\partial s} \left\{ \vec{I}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \cdot \vec{A}_0(s, \underline{s}) \right\} \\ &= \frac{\partial}{\partial s} \left\{ I(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \Lambda(s, \underline{s}) \right\} = 0 \quad . \end{aligned} \quad (1.37)$$

Über die Kontinuitätsgleichung

$$-\frac{\partial}{\partial t} \varrho_0^{(u)}(t, s', \underline{s}) \Lambda(s', \underline{s}) = \frac{\partial}{\partial s'} \left\{ \vec{j}(t, \vec{\ell}(s', \underline{s})) \cdot \vec{A}_0(s', \underline{s}) \right\} \quad (1.38)$$

definieren wir die Größe $\varrho_0^{(u)}(t, s', \underline{s})$ und erhalten

$$\begin{aligned}\varrho_0^{(u)}(t, s', \underline{s}) &= -\frac{1}{\Lambda(s', \underline{s})} \frac{\partial}{\partial s'} \int_{-\infty}^t \vec{j}(t', \vec{\ell}(s', \underline{s})) \cdot \vec{A}_0(s', \underline{s}) dt' \\ &= -\frac{1}{\Lambda(s', \underline{s})} \frac{\partial}{\partial s'} \left\{ \vec{I}(t, \vec{\ell}(s', \underline{s})) \cdot \vec{A}_0(s', \underline{s}) \right\} .\end{aligned}$$

Sie erfüllt die Beziehung

$$\int_s^\infty \varrho_0^{(u)}(t, s', \underline{s}) \Lambda(s', \underline{s}) ds' = \vec{I}(t, \vec{\ell}(s, \underline{s})) \cdot \vec{A}_0(s, \underline{s}) .$$

Einsetzen der Funktion $t = t(\vec{\ell}(s, \underline{s}))$ liefert

$$\begin{aligned}\int_s^\infty \varrho_0^{(u)}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), s', \underline{s}) \Lambda(s', \underline{s}) ds' &= \vec{I}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \cdot \vec{A}_0(s, \underline{s}) \\ &= I(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \Lambda(s, \underline{s}) = q_u(\underline{s})\end{aligned}$$

und damit die Unabhängigkeit der linken Seite von der Variablen s .

Die Dichte $\varrho_0^{(u)}(t, s, \underline{s})$ ist wegen der Kontinuitätsgleichung (1.38) mit der Variablen s für feste Werte von \underline{s} eine Erhaltungsgröße,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^\infty \varrho_0^{(u)}(t, s', \underline{s}) \Lambda(s', \underline{s}) ds' = 0 ,$$

falls

$$\lim_{s \rightarrow \pm\infty} \left\{ \vec{j}(t, \vec{\ell}(s, \underline{s})) \cdot \vec{A}_0(s, \underline{s}) \right\} = 0$$

gilt. Division von $\varrho_0^{(u)}(t, s, \underline{s})$ durch

$$N(\underline{s}) = \int_{-\infty}^\infty \varrho_0^{(u)}(t, s', \underline{s}) \Lambda(s', \underline{s}) ds'$$

ergibt die normierte Größe

$$\varrho_0(t, s, \underline{s}) = \frac{1}{N(\underline{s})} \varrho_0^{(u)}(t, s, \underline{s}) , \quad \int_{-\infty}^\infty \varrho_0(t, s', \underline{s}) \Lambda(s', \underline{s}) ds' = 1 .$$

Die der Beziehung für $\varrho_0^{(u)}(t, s, \underline{s})$ äquivalente Integralbeziehung

$$\int_s^\infty \varrho_0(t, s', \underline{s}) \Lambda(s', \underline{s}) ds' = q(\underline{s})$$

mit

$$q(\underline{s}) = \frac{1}{N(\underline{s})} q_u(\underline{s})$$

besagt, daß das zur Zeit t^{in} dem Bruchteil $q(\underline{s})$ zugeordnete Quantil $s^{\text{in}} = s(t^{\text{in}}, \underline{s})$ sich mit der Zeit ändert,

$$s = s(t, \underline{s}) ,$$

so daß der Bruchteil $q(\underline{s})$,

$$\int_{s(t, \underline{s})}^{\infty} \varrho_0(t, s', \underline{s}) \Lambda(s', \underline{s}) ds' = q(\underline{s}) \quad ,$$

zeitlich ungeändert bleibt. Durch Differentiation der linken Seite nach t erhalten wir

$$\varrho_0(t, s(t, \underline{s}), \underline{s}) \frac{\partial s(t, \underline{s})}{\partial t} \Lambda(s(t, \underline{s}), \underline{s}) = \frac{1}{N(\underline{s})} \vec{j}(t, \vec{\ell}(s(t, \underline{s}), \underline{s})) \cdot \vec{A}_0(s(t, \underline{s}), \underline{s}) \quad (1.39)$$

als Differentialgleichung für die Bogenlänge $s(t, \underline{s})$ als Funktion der Zeit für feste \underline{s} auf der Kurve $\vec{\ell}(s, \underline{s})$. Sie formuliert, ähnlich zu (1.3) in bezug auf (1.1), die differentielle Form der Beziehung zwischen s und t , die implizit durch die Identifikation $s = s(t(\vec{\ell}(s, \underline{s}), \underline{s}))$ mit der Umkehrung $t(\vec{\ell}(s(t, \underline{s}), \underline{s})) = t$ gegeben ist. Die Komplizierung liegt hier darin, daß der Vektor $\vec{\ell}(s(t, \underline{s}), \underline{s})$ explizit in die Gleichung eingeht und diese dadurch an die Lösung von $\vec{\lambda}^0 = \partial \vec{\ell} / \partial s$ gekoppelt ist.

Die Größe

$$\vec{j}(t, \vec{\ell}(s, \underline{s})) \cdot \vec{A}_0(s, \underline{s}) = \vec{j}(t, \vec{\ell}(s, \underline{s})) \cdot \vec{\lambda}_0(s, \underline{s}) = j_0(s, \underline{s})$$

ist die nullte kovariante Komponente bezüglich des krummlinigen Koordinatensystems der Stromdichte $\vec{j}(t, \vec{\ell}(s, \underline{s}))$. Damit hat $\varrho_0(t, s, \underline{s})$ die Bedeutung einer räumlichen Dichte, die über die Kontinuitätsgleichung (1.38) in einer Raumdimeension mit der nullten kovarianten Komponente $j_0(t, \vec{\ell}(s, \underline{s}))$ der Stromdichte verknüpft ist.

1.3.9 Alternative Parametrisierung

In Abschnitt 1.3.6 wurde mit (1.36) eine Parametrisierung als Bogenlänge eingeführt, in der der Einheitsvektor der integrierten Stromdichte auftritt. Man hätte ebenso die Stromdichte selbst verwenden können,

$$\frac{\partial \vec{\ell}}{\partial w_0} = \vec{I}(t(\vec{\ell}), \vec{\ell}) \quad .$$

Eine weitere äquivalente Gleichung erhält man, wenn man eine zeitintegrierte Dichte als Faktor verwendet,

$$P(\vec{q}) \frac{\partial \vec{q}}{\partial \tau} = \vec{I}(t(\vec{q}), \vec{q}) \quad , \quad (1.40)$$

mit $P(\vec{q})$ gegeben durch

$$P(\vec{q}) = \int_{-\infty}^{t(\vec{q})} \varrho(t', \vec{q}) dt' \quad .$$

Der Parameter τ hat damit die Dimension einer Zeit.

Mit der Anfangsbedingung

$$\vec{q}(\tau^{\text{in}}, \underline{\tau}) = \vec{q}^{\text{in}}(\underline{\tau}) \quad , \quad \underline{\tau} = (\tau_1, \tau_2) \quad ,$$

ergeben sich die Lösungen

$$\vec{q} = \vec{q}(\tau, \underline{\tau}) \quad ,$$

die von den drei Parametern $\tau_0 = \tau$ und $\underline{\tau} = (\tau_1, \tau_2)$ (hier anstelle von s, s_1, s_2 verwendet) abhängen.

Die Ortsvektoren $\vec{q}(\tau, \underline{\tau})$ bilden ein krummliniges Koordinatensystem, und die Differentiation nach den Parametern führt auf Basisvektoren $\vec{\lambda}^i(\tau, \underline{\tau})$ entsprechend Abschnitt 1.3.6. (Diese Basisvektoren unterscheiden sich von den vorigen gleichen Namens um skalare Faktoren.)

Mit der Ableitung von P nach den Parametern,

$$\frac{\partial P}{\partial \tau_k} = \frac{\partial \vec{q}}{\partial \tau_k} \cdot \vec{\nabla} P = \vec{\lambda}^k \cdot \vec{\nabla} P \quad ,$$

und (1.19) für die Ableitung der Jacobi-Determinante Λ erhält man für die Ableitung des Produkts $P\Lambda$

$$\frac{\partial(P\Lambda)}{\partial \tau_k} = \Lambda \vec{\lambda}^k \cdot \vec{\nabla} P + \Lambda P (\vec{\nabla} \cdot \vec{\lambda}^k) = \Lambda \vec{\nabla} \cdot (P \vec{\lambda}^k) \quad .$$

Im Spezialfall $k = 0$ erhält man mit $P \vec{\lambda}^0 = \vec{I}$, vgl. (1.40),

$$\frac{\partial(P\Lambda)}{\partial \tau} = \Lambda (\vec{\nabla} \cdot \vec{I}) \quad .$$

Die Forderung

$$\frac{\partial(P\Lambda)}{\partial \tau} = 0 \quad , \quad \text{d. h.} \quad P(\tau, \underline{\tau}) \Lambda(\tau, \underline{\tau}) = P(\tau^{\text{in}}, \underline{\tau}) \Lambda(\tau^{\text{in}}, \underline{\tau})$$

ist damit äquivalent zu

$$0 = \vec{\nabla} \cdot \vec{I} = \vec{j}(t(\vec{q}), \vec{q}) \cdot \vec{\nabla} t(\vec{q}) - \varrho(t(\vec{q}), \vec{q})$$

und entspricht damit Gleichung (1.13) oder (1.25).

Aus (1.40) erhält man

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial \tau} = \vec{V}(\vec{q}) \quad , \quad \vec{V}(\vec{q}) = \frac{\vec{I}(t(\vec{q}), \vec{q})}{P(\vec{q})} \quad .$$

Die Geschwindigkeit $\vec{V}(\vec{q})$ ist dann definiert durch

$$\vec{V}(\vec{q}) = \frac{1}{P(\vec{q})} \int_{-\infty}^{t(\vec{q})} \vec{j}(t', \vec{q}) dt' = \int_{-\infty}^{t(\vec{q})} W(t', \vec{q}) \vec{v}(t', \vec{q}) dt'$$

mit der zeitlichen Wahrscheinlichkeitsdichte

$$W(t', \vec{q}) = \frac{\varrho(t', \vec{q})}{P(\vec{q})} \quad ,$$

normiert auf das Intervall $-\infty < t' < t(\vec{q})$. Die Geschwindigkeit $\vec{V}(\vec{q})$ stellt sich daher heraus als zeitlicher Erwartungswert bezüglich der Wahrscheinlichkeitsdichte $W(t', \vec{q})$ über dem Zeitintervall $-\infty < t' < t(\vec{q})$.

1.3.10 Spezialisierung der krummlinigen Anfangskoordinaten

Für die Vorgabe der Anfangsbedingungen wählen wir eine Funktion

$$S^{\text{in}} = S^{\text{in}}(\vec{x}) \quad .$$

Die Lösungen

$$\vec{x}^{\text{in}} = \vec{x}^{\text{in}}(\underline{s}) \quad , \quad \underline{s} = (s_1, s_2) \quad ,$$

der Gleichung

$$S^{\text{in}}(\vec{x}^{\text{in}}(\underline{s})) = a^{\text{in}}$$

definieren eine Fläche im dreidimensionalen Raum. Für die Anfangszeit t^{in} beschreibt

$$\vec{I}(t^{\text{in}}, \vec{x}^{\text{in}}(\underline{s})) = \int_{-\infty}^{t^{\text{in}}} \vec{j}(t', \vec{x}^{\text{in}}(\underline{s})) dt'$$

die Flächendichte des Flusses im Zeitintervall $-\infty < t' < t^{\text{in}}$ durch die Fläche bei $\vec{x}^{\text{in}}(\underline{s})$. Wir bestimmen die Parametrisierung der Örter auf der Fläche $\vec{x}(a, \underline{s})$ für festes a , die die Bedingung

$$\vec{I}(t^{\text{in}}, \vec{x}^{\text{in}}(\underline{s})) \cdot \vec{A}_0(s^{\text{in}}, \underline{s}) = q$$

erfüllt, d. h. unabhängig von den Flächenparametern $\underline{s} = (s_1, s_2)$ ist. Dabei ist die Flächendichte $\vec{A}_0(s^{\text{in}}, \underline{s})$ durch

$$\vec{A}_0(s^{\text{in}}, \underline{s}) = \frac{\partial \vec{x}^{\text{in}}(\underline{s})}{\partial s_1} \times \frac{\partial \vec{x}^{\text{in}}(\underline{s})}{\partial s_2}$$

gegeben. Da die Richtung der Normalen $\hat{\vec{A}}_0 = \vec{A}_0/A_0$, $A_0 = |\vec{A}_0|$, nur von der Wahl der Anfangsfläche S^{in} und nicht von der Parametrisierung $\vec{x}^{\text{in}}(\underline{s})$ abhängt, bestimmt sich die Parametrisierung aus

$$A_0(s^{\text{in}}, \underline{s}) = \frac{q}{\vec{I}(t^{\text{in}}, \vec{x}^{\text{in}}(\underline{s})) \cdot \hat{\vec{A}}_0(s^{\text{in}}, \underline{s})} \quad .$$

Mit dieser speziellen Wahl der Parametrisierung wird die Größe q_u , die nach (1.32) unabhängig von s ist, nun auch unabhängig von \underline{s} . Es gilt

$$\frac{\partial}{\partial s_i} q_u(s, \underline{s}) = \frac{\partial}{\partial s_i} \left\{ \vec{I}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s})), \vec{\ell}(s, \underline{s})) \cdot \vec{A}_0(s, \underline{s}) \right\} = 0 \quad . \quad (1.41)$$

Zusammen mit (1.37) ist die Größe

$$q_u(s, \underline{s}) = q \quad (1.42)$$

unabhängig von s und \underline{s} . Dieses Resultat besagt, daß an jedem Punkt $\vec{\ell}(s, \underline{s})$ des Raumes der Durchfluß $q_u(s, \underline{s})$ während des Zeitintervalls $-\infty < t < t(\vec{\ell}(s, \underline{s}))$ der gleiche wie auf der Anfangsfläche bei $\vec{x}^{\text{in}} = \vec{x}^{\text{in}}(\underline{s})$ zur Zeit t^{in} ist. Die Zeit $t_A(\vec{\ell}(s, \underline{s}))$ ist die Ankunftszeit des Punktes auf der Trajektorie

$$\vec{r} = \vec{r}(t_A, \underline{u})$$

am Ort $\vec{\ell}(s, \underline{s})$. Diese Ankunftszeit t_A ist Lösung der Gleichung

$$\vec{r}(t_A, \underline{u}) = \vec{\ell}(s, \underline{s})$$

in der Form

$$t_A = t_A(\vec{\ell}(s, \underline{s}))$$

mit den Kurvenparameterwerten

$$\underline{u} = \underline{u}(\vec{\ell}(s, \underline{s}))$$

auf der Anfangsfläche bei $\vec{x}^{\text{in}} = \vec{x}^{\text{in}}(\underline{u})$.

1.3.11 Signaltransport. Bohmsche Trajektorien

Die Forderung (1.13)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r}) = 0$$

ist der Aussage

$$\int_{(V)} \vec{I}(t(\vec{r}'), \vec{r}') \cdot d\vec{a}' = 0$$

äquivalent. Hier ist V ein Volumen mit der Oberfläche (V) .

Wir wählen ein spezielles endliches Volumen V mit einer aus drei Stücken bestehenden Oberfläche. Die Grundfläche sei ein Gebiet a^{in} in der Fläche der Anfangsbedingungen zur Zeit $t = t^{\text{in}}$ (1.27). Ihre Berandung ist die geschlossene Kurve (a^{in}) in der Fläche der Anfangsbedingungen zu Zeit $t = t^{\text{in}}$. Ausgehend von der Berandung (a^{in}) der Grundfläche wählen wir die Detektorverbindungskurven $\vec{\ell}(s, \underline{s})$ als Lösungen der Differentialgleichung (1.36) mit den Anfangsbedingungen

$$\vec{\ell}^{\text{in}}(\underline{s}) = \vec{\ell}(s^{\text{in}}, \underline{s}) \quad ,$$

wobei die Orte $\vec{\ell}^{\text{in}}(\underline{s})$ auf der Berandungskurve (a^{in}) liegen. Die Schar der Detektorverbindungskurven bildet den Mantel einer von (a^{in}) ausgehenden Röhre. Den

Deckel a_s der Röhre bilden die Orte $\vec{\ell}(s, \underline{s})$ mit festem s und allen $\underline{s} = (s_1, s_2)$, die der Bedingung $\vec{\ell}^{\text{in}}(\underline{s}) \in a^{\text{in}}$ genügen, d. h. deren Anfangsorte in der Grundfläche a^{in} liegen.

Die Mantelfläche ist an jedem Ort parallel zu den Stromlinien der durch $\vec{I}(t(\vec{r}), \vec{r})$ beschriebenen Strömung gewählt, durch sie tritt keine Strömung nach außen. Damit tritt die Strömung nur durch die Boden- und Deckelfläche a^{in} bzw. a_s in das Volumen V ein oder aus diesem heraus. Daher gilt

$$\begin{aligned} Q_u(a_s) &= \int_{a_s} \vec{I}(t(\vec{r}'), \vec{r}') \cdot d\vec{a}' = \iint_{S^{(2)}} \vec{I}(t(\vec{\ell}(s, \underline{s}')), \vec{\ell}(s, \underline{s}')) \cdot \vec{A}_0(s, \underline{s}') d^2 \underline{s}' \\ &= \iint_{S^{(2)}} \vec{I}(t^{\text{in}}, \vec{\ell}^{\text{in}}(\underline{s}')) \cdot \vec{A}_0(s^{\text{in}}, \underline{s}') d^2 \underline{s}' = \int_{a^{\text{in}}} \vec{I}(t^{\text{in}}, \vec{r}') \cdot d\vec{a}' \quad , \quad (1.43) \end{aligned}$$

die Durchflüsse durch Boden- und Deckelfläche sind gleich.

Anstelle der Deckelfläche bestehend aus den Orten $\vec{\ell}(s, \underline{s})$, $\vec{\ell}^{\text{in}}(\underline{s}) \in a^{\text{in}}$, wählen wir nun die Fläche a_t bestehend aus den Punkten $\vec{r}(t, \underline{u}(t, \underline{s}))$. Hier sind das Funktionenpaar $\underline{u}(t, \underline{s}) = (u_1(t, \underline{s}), u_2(t, \underline{s}))$ zusammen mit der Funktion $s(t, \underline{s})$ als Lösungen der Gleichung

$$\vec{r}(t, \underline{u}(t, \underline{s})) = \vec{\ell}(s(t, \underline{s}), \underline{s})$$

gegeben. Die Deckelfläche a_t besteht damit aus den Punkten der Fläche $\vec{r}(t, \underline{u}(t, \underline{s}))$ mit der Einschränkung $\vec{\ell}^{\text{in}}(\underline{s}) \in a^{\text{in}}$, die aus Orten besteht, die zur gleichen Zeit t gehören. Der Fluß durch die Deckelfläche a_t ist gleich dem durch die Grundfläche a^{in} (1.35), da kein Fluß durch die Mantelfläche stattfindet, d. h.

$$\begin{aligned} Q_u(a_t) &= \int_{a_t} \vec{I}(t(\vec{r}'), \vec{r}') \cdot d\vec{a}' \\ &= \iint_{S^{(2)}} \vec{I}(t(\vec{r}(t, \underline{u}(t, \underline{s}')), \vec{r}(t, \underline{u}(t, \underline{s}')))) \cdot \vec{A}_0(s(t, \underline{s}'), \underline{s}') d^2 \underline{s}' \\ &= \iint_{S^{(2)}} \vec{I}(t^{\text{in}}, \vec{\ell}^{\text{in}}(\underline{s}')) \cdot \vec{A}_0(s^{\text{in}}, \underline{s}') d^2 \underline{s}' = \int_{a^{\text{in}}} \vec{I}(t^{\text{in}}, \vec{r}') \cdot d\vec{a}' \quad , \quad (1.44) \end{aligned}$$

wobei $t(\vec{r}(t, \underline{u}(t, \underline{s}'))) = t$ gilt.

Die Spezialisierung der krummlinigen Anfangskordinaten in Abschnitt 1.3.10 ist so vorgenommen, daß die Flußdichte $q_u(s, \underline{s})$ nicht nur von s , sondern auch von \underline{s} unabhängig ist, vgl. (1.41), (1.42). Damit ist sowohl (1.43) wie (1.44) nur von dem Parameter(flächen)inhalt

$$S_a = \iint_{S^{(2)}} d^2 \underline{s}$$

des Gebietes $S^{(2)}$, nicht aber von dessen Lage in der Fläche der Anfangsbedingungen abhängig.

Man stattet jeden Raumpunkt $\vec{\ell}$ einer Fläche mit einem Detektor mit der infinitesimalen Eintrittsfläche

$$d^2 \vec{F}(s, \underline{s}) = \vec{A}_0(s, \underline{s}) ds_1 ds_2$$

aus. Der Wert

$$d^2Q_{\mathbf{u}} = q_{\mathbf{u}}(s(t, \underline{\mathbf{s}}), \underline{\mathbf{s}}) ds_1 ds_2$$

des Flusses durch die Eintrittsfläche $d^2\vec{F}$ des Detektors wird zum Zeitpunkt $t(\vec{\ell}(s(t, \underline{\mathbf{s}}), \underline{\mathbf{s}})) = t$ erreicht.

Die Charakteristiken $\vec{r}(t, \underline{\mathbf{u}}) = \vec{r}_c(t, \underline{\mathbf{u}})$, vgl. Abschnitt 1.3.5, die zur Ankunftszeitfläche $t(\vec{r})$ gehören, erlauben damit folgende Interpretation: Die Trajektorie $\vec{r}(t, \underline{\mathbf{u}})$ mit $\vec{r}(t^{\text{in}}, \underline{\mathbf{u}}) = \vec{r}^{\text{in}}(\underline{\mathbf{u}})$ beschreibt die Bahn eines Signals, das zum Zeitpunkt t^{in} vom Ort $\vec{r}^{\text{in}}(\underline{\mathbf{u}})$ ausgeht und zur Zeit t am Ort $\vec{r}(t, \underline{\mathbf{u}})$ ankommt. Dies liefert im Fall der nichtrelativistischen Quantenmechanik die wahrscheinlichkeitstheoretische Interpretation der Bohmschen Trajektorien [3, 4], die in Anhang A.4 beschrieben werden. Die zugehörige Geschwindigkeit des Signals wird dann durch (1.24) beschrieben, wodurch die Geschwindigkeit des (lokalen) kausalen Transports gegeben ist, die somit hier als Quantilgeschwindigkeit interpretiert wird.

1.4 Das freie gaußsche Wellenpaket

Wir geben hier die expliziten Ausdrücke verschiedener Dichten und Ströme aus Anhang A für ein n -dimensionales, sphärisch symmetrisches, freies gaußsches Wellenpaket an. Konkrete Darstellungen beziehen sich in der Folge auf den Fall $n = 2$.

Die Wellenfunktion ψ wird nach Betrag M und Phase S/\hbar mit der Wirkung S aufgespalten, vgl. [9]:

$$\begin{aligned} \psi &= M e^{\frac{i}{\hbar} S} \quad , \quad M = \sqrt{\varrho} \quad , \\ \varrho(t, \vec{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sigma_x^n(t)} \exp\left(-\frac{(\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t)^2}{2\sigma_x^2(t)}\right) \quad , \quad \sigma_x^2(t) = \sigma_{x0}^2 + \sigma_v^2 t^2 \quad , \\ S(t, \vec{r}) &= m \left[\vec{v}_0 + \frac{\sigma_v^2}{2\sigma_x^2(t)} t(\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t) \right] \cdot (\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t) + \frac{\vec{p}_0^2}{2m} t + \hbar \alpha(t) \quad , \\ \alpha(t) &= -\frac{n}{2} \arctan\left(\frac{\sigma_v t}{\sigma_{x0}}\right) \quad . \end{aligned}$$

Dabei sind \vec{r}_0 , \vec{v}_0 und \vec{p}_0 Anfangsort, -geschwindigkeit und -impuls, σ_{x0} und $\sigma_x(t)$ anfängliche und zeitabhängige räumliche Breite und $\sigma_v = \sigma_p/m$ die Breite der Geschwindigkeit bzw. σ_p die des Impulses mit $\sigma_{x0}\sigma_p = \hbar/2$.

Die Stromdichte $\vec{j} = M^2 \vec{\nabla} S/\hbar$ sowie deren zeitintegrierte Werte $\vec{I}_j = \int_{-\infty}^t \vec{j} dt'$ sind in Bild 1.1 dargestellt für ein freies zweidimensionales gaußsches Wellenpaket. (Die explizite Form von $\vec{\nabla} S$ wird in der Folge angegeben.) Das Wellenpaket bewegt sich in x -Richtung und befindet sich bei $t = 0$ im Koordinatenursprung: Es besitzt die Parameter $x_0 = y_0 = 0$, $v_{0x} = 1$, $v_{0y} = 0$ und $\sigma_{x0} = 1$, $\sigma_v = 1/2$ mit $m = \hbar = 1$. Im Fall eines (örtlich) unkorrelierten gaußschen Wellenpakets separieren die drei Ortskoordinaten in der Stromdichte, und die Koordinaten der

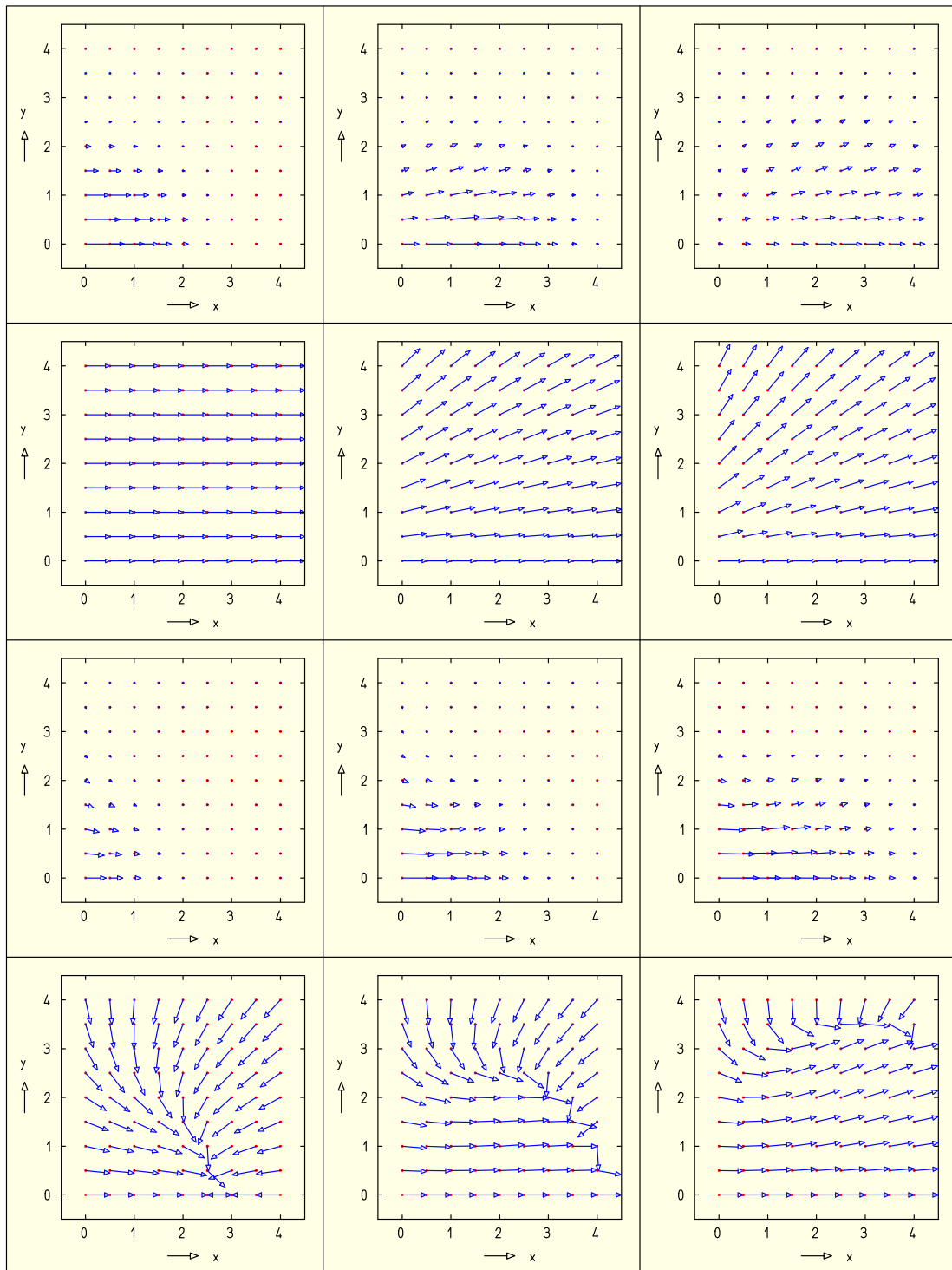


Abbildung 1.1: Wahrscheinlichkeitsstromdichte, momentan und integriert, eines zweidimensionalen gaußschen Wellenpakets zu jeweils drei Zeiten, $t = t_0 + i \Delta t$, $i = 0, 1, 2$, mit $\Delta t = 1$. Von oben nach unten gezeigt sind: \vec{j} , \tilde{j} , \vec{I} , \tilde{I} .

Stromtrajektorien ergeben sich aus der eindimensionalen Lösung, vgl. [8]; im Fall des sphärisch symmetrischen Pakets erhält man

$$\vec{r}(t) = \vec{r}_0 + \vec{v}_0 t + \frac{\sigma_x(t)}{\sigma_{x0}} (\vec{r}(0) - \vec{r}_0) \quad .$$

Die Integration der Stromdichte erfolgt auf numerischem Weg, vgl. Abschnitt 1.6.3. Um das Zentrum des Pakets herum sowie in bereits von diesem überstrichenen Gebieten besitzt die integrierte Stromdichte eine positive x -Komponente. Außerhalb dieser, insbesondere bei größeren x -Koordinaten, überwiegen die Anteile mit negativer x -Komponente, die von der Kontraktion des Wellenpaketes zu früheren Zeiten herrühren. Besonders in der Darstellung der normierten Größe \vec{I}_j ist der Übergang in der Richtungsänderung der x -Komponente zu erkennen.

Wegen $V = 0$ lautet die (kinetische) Energiedichte 1 (A.3) allgemein

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla}\psi^*) \cdot (\vec{\nabla}\psi) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\vec{\nabla}M - \frac{i}{\hbar} M(\vec{\nabla}S) \right) e^{-\frac{i}{\hbar}S} \cdot \left(\vec{\nabla}M + \frac{i}{\hbar} M(\vec{\nabla}S) \right) e^{\frac{i}{\hbar}S} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left((\vec{\nabla}M)^2 + \frac{M^2}{\hbar^2} (\vec{\nabla}S)^2 \right) \end{aligned}$$

und mit den expliziten Ausdrücken

$$\vec{\nabla}M(t, \vec{r}) = -\frac{1}{2} \frac{\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t}{\sigma_x^2(t)} M(t, \vec{r}) \quad , \quad \vec{\nabla}S(t, \vec{r}) = m \frac{\sigma_{x0}^2}{\sigma_x^2(t)} \left(\vec{v}_0 + \frac{\sigma_v^2}{\sigma_{x0}^2} t (\vec{r} - \vec{r}_0) \right)$$

für den Fall des gaußschen Wellenpakets speziell

$$\varepsilon_1(t, \vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4\sigma_x^2(t)} \left(\frac{\vec{v}_0^2}{\sigma_v^2} + \frac{(\vec{r} - \vec{r}_0)^2}{\sigma_{x0}^2} \right) \varrho(t, \vec{r}) \quad .$$

Die Gesamtenergie 1,

$$\int \varepsilon_1(t, \vec{r}) dV = \frac{n}{2} m \sigma_v^2 + \frac{1}{2} m \vec{v}_0^2 \quad ,$$

als über den gesamten Raum integrierte Energiedichte, besitzt zwei Anteile, zum einen die kinetische Schwerpunktsenergie und zum anderen die dimensionsabhängige kinetische Energie herrührend von der Dispersion des Wellenpakets.

Für die Energiestromdichte 1 ergibt sich mit der Einführung der Größen M und S aus (A.5) allgemein

$$\begin{aligned} \vec{\pi}_{\varepsilon_1} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[(\vec{\nabla}\psi^*) \left(\frac{\partial\psi}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \right) (\vec{\nabla}\psi) \right] = -\frac{\hbar^2}{m} \operatorname{Re} \left((\vec{\nabla}\psi^*) \frac{\partial\psi}{\partial t} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{m} \operatorname{Re} \left\{ \left(\vec{\nabla}M - \frac{i}{\hbar} M(\vec{\nabla}S) \right) e^{-\frac{i}{\hbar}S} \left(\frac{\partial M}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} M \frac{\partial S}{\partial t} \right) e^{\frac{i}{\hbar}S} \right\} \\ &= -\frac{\hbar^2}{m} \left((\vec{\nabla}M) \frac{\partial M}{\partial t} + \frac{M^2}{\hbar^2} (\vec{\nabla}S) \frac{\partial S}{\partial t} \right) \quad . \end{aligned}$$

Die Zeitableitungen von M und S im Fall des gaußschen Wellenpakets lauten

$$\begin{aligned} \frac{\partial M(t, \vec{r})}{\partial t} &= \frac{1}{2\sigma_x^4(t)} \left(\sigma_x^2(t) \left((\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t) \cdot \vec{v}_0 - n\sigma_v^2 t \right) \right. \\ &\quad \left. + \sigma_v^2 t (\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t)^2 \right) M(t, \vec{r}) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(t, \vec{r})}{\partial t} &= \frac{1}{2\sigma_x^4(t)} \left(m\sigma_v^2(\sigma_{x0}^2 - \sigma_v^2 t^2) (\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t)^2 \right. \\ &\quad \left. - \sigma_x^2(t) \left(2m\sigma_v^2 t (\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t) \cdot \vec{v}_0 + m\vec{v}_0^2 \sigma_x^2(t) + n\hbar\sigma_v\sigma_{x0} \right) \right) , \end{aligned}$$

womit sich in diesem Fall $\vec{\pi}_{\varepsilon 1}$ zu

$$\begin{aligned} \vec{\pi}_{\varepsilon 1}(t, \vec{r}) &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4\sigma_x^2(t)} \left[\left(2n + \frac{\vec{v}_0^2}{\sigma_v^2} - \frac{(\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t)^2}{\sigma_x^2(t)} \right) \vec{v}_0 \right. \\ &\quad \left. + \left(2 \frac{(\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t) \cdot \vec{v}_0}{\sigma_{x0}^2} + \sigma_v^2 t \left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t)^2}{\sigma_{x0}^2 \sigma_x^2(t)} + 4 \frac{m^2}{\hbar^2} \vec{v}_0^2 \right) \right) (\vec{r} - \vec{r}_0) \right] \varrho(t, \vec{r}) \end{aligned}$$

ergibt.

Bild 1.2 zeigt die Energiestromdichte 1 für das freie zweidimensionale gaußsche Wellenpaket so wie Bild 1.1 die Größen \vec{j} und \vec{I}_j als momentane und zeitintegrierte Stromdichte zeigt. Wie man aus der Betrachtung von $\vec{\pi}_{\varepsilon 1}$ (obere Bildzeile) erkennt, laufen die relevanten Teile der Energie, abgesehen von der Dispersion, in Richtung der Anfangsgeschwindigkeit. Für größere Abstände vom Zentrum des Wellenpakets fließt die Energie jedoch in die entgegengesetzte Richtung, insbesondere an Stellen des Pakets vom Zentrum ausgehend senkrecht zur Bewegungsrichtung. Das globale Verhalten der integrierten Stromdichte ist ähnlich dem für die Stromdichte der Wahrscheinlichkeitsdichte, wobei die Übergangsbereiche der Vorzeichenumkehr der jeweiligen x -Komponente an anderen Stellen liegen.

Eine Einführung von Betrag und Phase ergibt für die (kinetische) Energiedichte 2 (A.7)

$$\begin{aligned} \varepsilon_2 &= -\frac{\hbar^2}{4m} (\psi^*(\Delta\psi) + (\Delta\psi^*)\psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{Re} (\psi^*(\Delta\psi)) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{Re} \left\{ M e^{-\frac{i}{\hbar} S} \left(\Delta M + 2 \frac{i}{\hbar} (\vec{\nabla} M) \cdot (\vec{\nabla} S) - \frac{1}{\hbar^2} M (\vec{\nabla} S)^2 + \frac{i}{\hbar} M \Delta S \right) e^{\frac{i}{\hbar} S} \right\} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{M^2}{\hbar^2} (\vec{\nabla} S)^2 - M \Delta M \right) . \end{aligned}$$

Für den Laplace-Operator auf M angewandt erhält man hier

$$\Delta M(t, \vec{r}) = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} M(t, \vec{r}) = \left(\frac{1}{4} \frac{(\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t)^2}{\sigma_x^4(t)} - \frac{n}{2\sigma_x^2(t)} \right) M(t, \vec{r}) ,$$

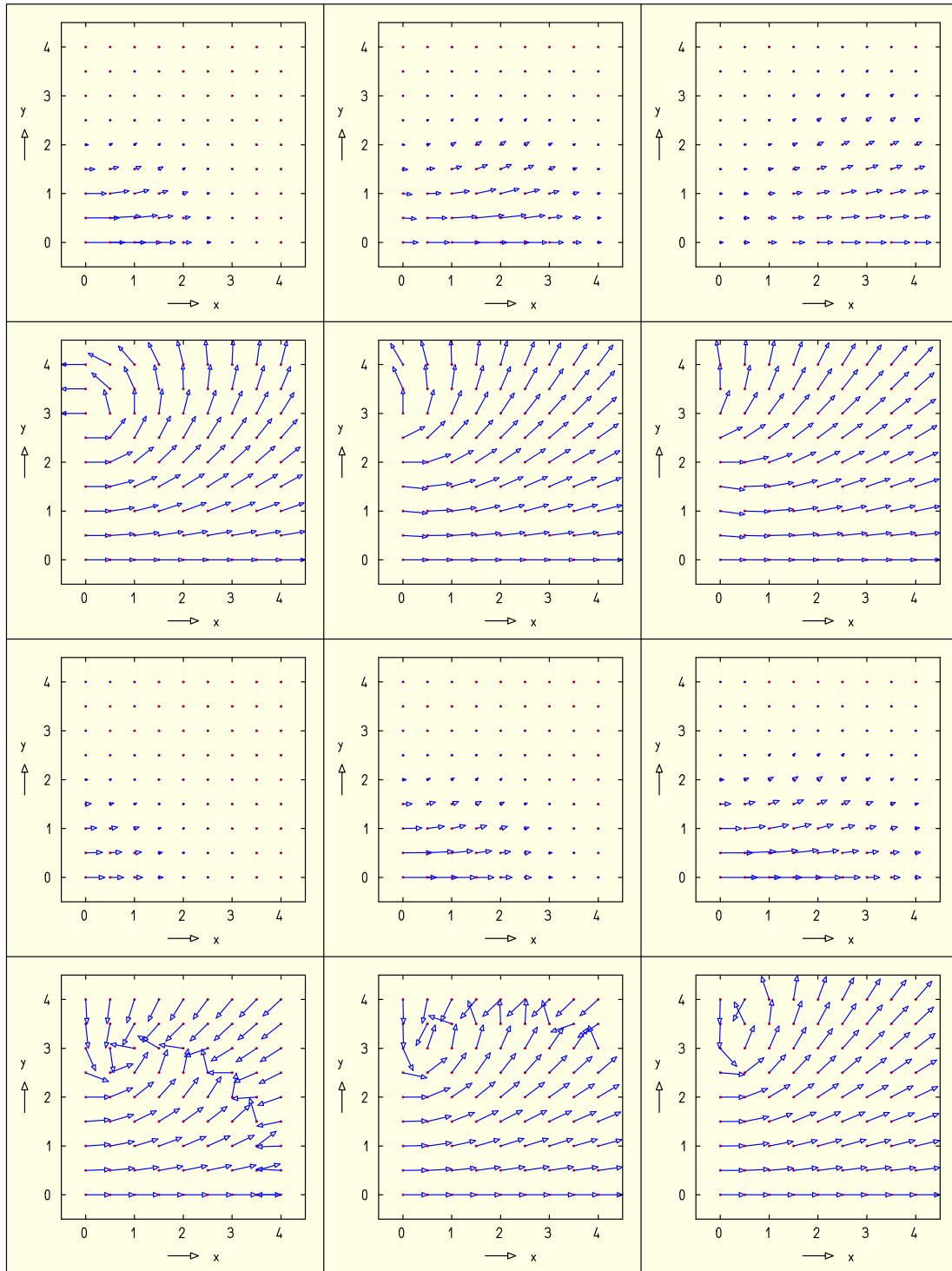


Abbildung 1.2: Energiestromdichte, momentan und integriert; Wellenpaket und Darstellung wie in Bild 1.1. Von oben nach unten: $\vec{\pi}_{\varepsilon 1}$, $\hat{\vec{\pi}}_{\varepsilon 1}$, $\vec{I}_{\varepsilon 1}$, $\hat{\vec{I}}_{\varepsilon 1}$.

wodurch sich für ε_2 folgender Ausdruck ergibt:

$$\begin{aligned} \varepsilon_2(t, \vec{r}) &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4\sigma_x^4(t)} \left((\sigma_{x0}^2 - \sigma_v^2 t^2) \left(\frac{\vec{v}_0^2}{\sigma_v^2} - \frac{(\vec{r} - \vec{r}_0)^2}{\sigma_{x0}^2} \right) \right. \\ &\quad \left. + 4t\vec{v}_0 \cdot (\vec{r} - \vec{r}_0) + 2n\sigma_x^2(t) \right) \varrho(t, \vec{r}) \quad . \end{aligned}$$

Über den gesamten Raum integriert ergibt sich für die Gesamtenergie natürlich der gleiche Ausdruck wie für ε_1 . Für die Energiestromdichte 2 sei hier lediglich der allgemeine Ausdruck angegeben (A.8),

$$\begin{aligned} \vec{\pi}_{\varepsilon_2} &= \frac{1}{2} \vec{\pi}_{\varepsilon_1} + \frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{Re} \left(\psi^* \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \psi \right) \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left((\vec{\nabla} M) \frac{\partial M}{\partial t} - M \frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} M + 2 \frac{M^2}{\hbar^2} (\vec{\nabla} S) \frac{\partial S}{\partial t} \right) \quad . \end{aligned}$$

Die „klassische“ (kinetische) Energiedichte, die sich aus der p -integrierten Phasenraumverteilung ergibt, vgl. Abschnitt A.2.2, lautet hier

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{cl}}(t, \vec{r}) &= \frac{1}{2} (\varepsilon_1(t, \vec{r}) + \varepsilon_2(t, \vec{r})) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{4\sigma_x^4(t)} \left(n\sigma_x^2(t) + \left(\frac{\sigma_v}{\sigma_{x0}} (\vec{r} - \vec{r}_0)t + \frac{\sigma_{x0}}{\sigma_v} \vec{v}_0 \right)^2 \right) \varrho(t, \vec{r}) \quad . \end{aligned}$$

Für ein gaußsches Wellenpaket ist diese Dichte positiv, was (auch ohne Potential) nicht für alle Wellenpakete gilt. Die zugehörige „klassische“ (kinetische) Energiestromdichte schreibt sich

$$\begin{aligned} \vec{\pi}_{\text{ecl}}(t, \vec{r}) &= \frac{1}{2} (\vec{\pi}_{\varepsilon_1}(t, \vec{r}) + \vec{\pi}_{\varepsilon_2}(t, \vec{r})) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\sigma_{x0}^2}{4\sigma_x^6(t)} \left((n+2)\sigma_x^2(t) + \left(\frac{\sigma_v}{\sigma_{x0}} (\vec{r} - \vec{r}_0)t + \frac{\sigma_{x0}}{\sigma_v} \vec{v}_0 \right)^2 \right) \\ &\quad \times \left(\vec{v}_0 + \frac{\sigma_v^2 (\vec{r} - \vec{r}_0)t}{\sigma_{x0}^2} \right) \varrho(t, \vec{r}) \quad . \end{aligned}$$

Für das sphärisch symmetrische gaußsche Wellenpaket speziell besitzt diese Energiestromdichte die Richtung der Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j} .

In Bild 1.3 sind die „klassische“ Energiestromdichte $\vec{\pi}_{\text{ecl}}$ sowie deren zeitintegrierte Stromdichte \vec{I}_{ecl} für das hier betrachtete Wellenpaket aus den Bildern 1.1 und 1.2 dargestellt. Durch die zuvor beschriebene Gleichheit der Stromrichtungen besitzt diese Energiestromdichte sowohl momentan als auch integriert größere Ähnlichkeit mit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte. Dies gilt ebenso für die Übergangsbereiche der Vorzeichenumkehr der x -Komponente der integrierten Stromdichten.

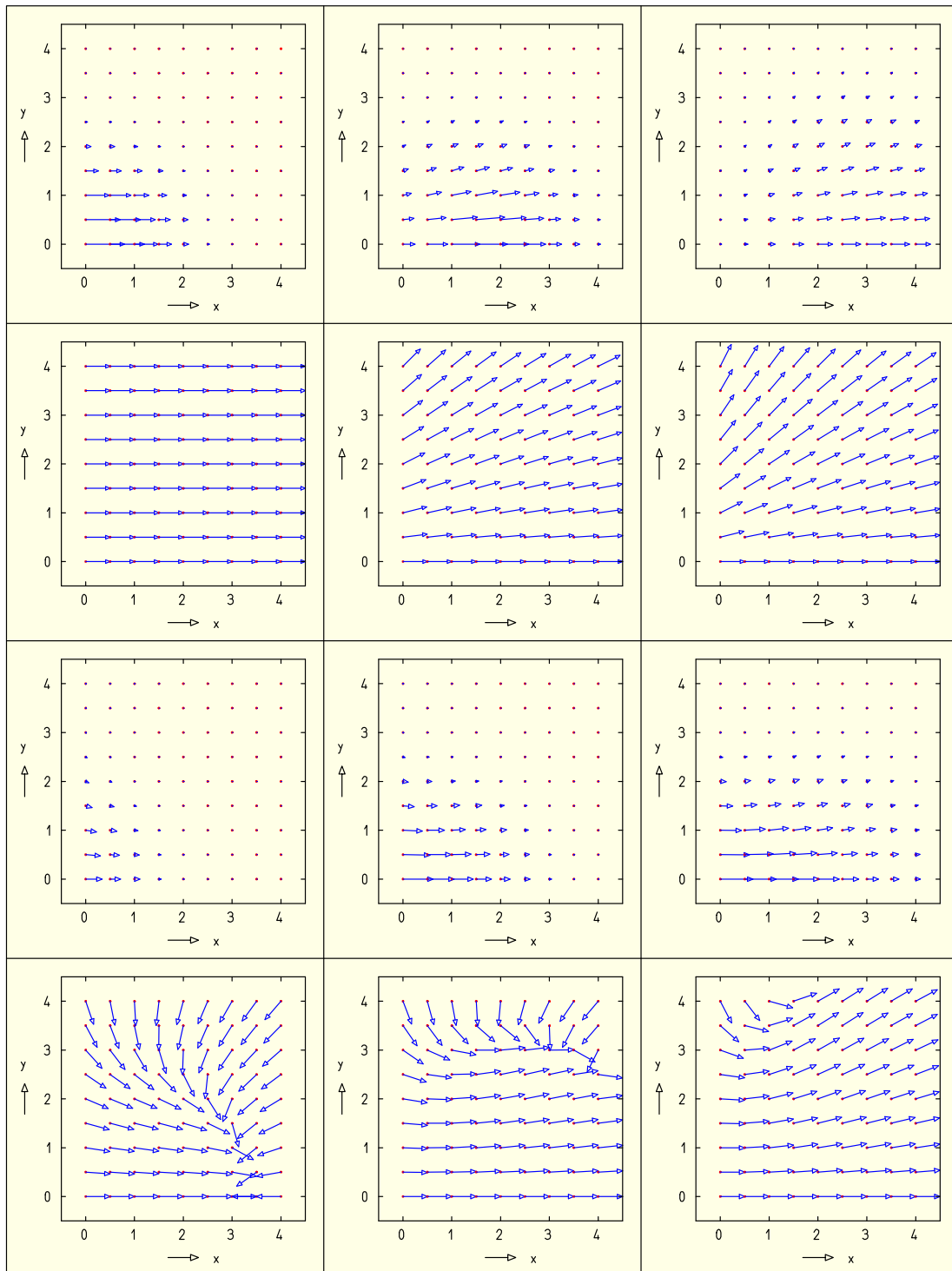


Abbildung 1.3: „Klassische“ Energiestromdichte, Darstellung wie in Bild 1.2. Von oben nach unten: $\vec{\pi}_{\text{ecl}}$, $\hat{\vec{\pi}}_{\text{ecl}}$, \vec{I}_{ecl} , $\hat{\vec{I}}_{\text{ecl}}$.

Weitere Größen werden aus Gründen der Vollständigkeit angegeben. Die Impulsdichte folgt direkt aus der Stromdichte,

$$\vec{\pi} = m\vec{j} = \hbar \operatorname{Im}(\psi^* \vec{\nabla} \psi) = M^2 \vec{\nabla} S \quad ,$$

mit dem speziellen Resultat

$$\vec{\pi}(t, \vec{r}) = m \frac{\sigma_{x0}^2}{\sigma_x^2(t)} \left(\vec{v}_0 + \frac{\sigma_v^2}{\sigma_{x0}^2} t(\vec{r} - \vec{r}_0) \right) \varrho(t, \vec{r}) \quad .$$

Der allgemeine Ausdruck für den Spannungstensor hat die Form (A.9)

$$\begin{aligned} \underline{\underline{T}}_{\pi} &= \frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{Re} \left(2(\vec{\nabla} \psi^*) \otimes (\vec{\nabla} \psi) - (\psi^* (\Delta \psi) + (\vec{\nabla} \psi^*) \cdot (\vec{\nabla} \psi)) \underline{\underline{1}} \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{Re} \left\{ 2 \left(\vec{\nabla} M - \frac{i}{\hbar} M(\vec{\nabla} S) \right) e^{-\frac{i}{\hbar} S} \otimes \left(\vec{\nabla} M + \frac{i}{\hbar} M(\vec{\nabla} S) \right) e^{\frac{i}{\hbar} S} \right. \\ &\quad - \left[M e^{-\frac{i}{\hbar} S} \left(\Delta M + 2 \frac{i}{\hbar} (\vec{\nabla} M) \cdot (\vec{\nabla} S) - \frac{M}{\hbar^2} (\vec{\nabla} S)^2 - \frac{i}{\hbar} M(\Delta S) \right) e^{\frac{i}{\hbar} S} \right. \\ &\quad \left. \left. + \left(\vec{\nabla} M - \frac{i}{\hbar} M(\vec{\nabla} S) \right) e^{-\frac{i}{\hbar} S} \cdot \left(\vec{\nabla} M + \frac{i}{\hbar} M(\vec{\nabla} S) \right) e^{\frac{i}{\hbar} S} \right] \underline{\underline{1}} \right\} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(2(\vec{\nabla} M) \otimes (\vec{\nabla} M) + 2 \frac{M^2}{\hbar^2} (\vec{\nabla} S) \otimes (\vec{\nabla} S) - (M(\Delta M) + (\vec{\nabla} M)^2) \underline{\underline{1}} \right) . \end{aligned}$$

Für das gaußsche Wellenpaket erhält man den folgenden Ausdruck für den Spannungstensor:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{T}}_{\pi}(t, \vec{r}) &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\sigma_x^2(t)} \left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}_0) \otimes (\vec{r} - \vec{r}_0)}{\sigma_{x0}^2} + \frac{\vec{v}_0 \otimes \vec{v}_0}{\sigma_v^2} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2\sigma_x^2(t)} \left(\frac{(\vec{r} - \vec{r}_0 - \vec{v}_0 t)^2}{\sigma_x^2(t)} - n \right) \underline{\underline{1}} \right) \varrho(t, \vec{r}) \quad . \end{aligned}$$

1.5 Energiefluß der klassischen elektromagnetischen Dipolstrahlung

Wir betrachten einen sich am Koordinatenursprung befindlichen, klassischen, zeitabhängigen elektrischen Punktdipol, dessen Abstrahlung mit der vollständigen (Nahfeld-)Lösung untersucht werden soll. Der Dipol selbst habe eine feste räumliche Ausrichtung, so daß nur die Projektion des Dipolmoments auf seine (feste) Achse variiert. Die exakte Lösung für die elektromagnetischen Felder findet sich in Standard-Textbüchern über klassische Elektrodynamik, z. B. in [7] oder [34]. Die Stromlinien bzw. -trajektorien des elektromagnetischen Energietransports können auch als Bohmsche Trajektorien für Photonen aufgefaßt werden [23].

Das Dipolmoment wird mit $\vec{d} = \vec{d}(ct)$ bezeichnet ($r = 0$); an Punkten außerhalb des Ursprungs wird im folgenden (z. T.) implizit der retardierte Wert $\vec{d} = \vec{d}(ct - r)$ verwendet. Elektrisches und magnetisches Feld besitzen die Form

$$\begin{aligned}\vec{E}_e &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[-\frac{\vec{d}''}{r} + \frac{(\vec{d}'' \cdot \hat{r})\hat{r}}{r^3} - \frac{\vec{d}'}{r^2} + \frac{3(\vec{d}' \cdot \hat{r})\hat{r}}{r^4} - \frac{\vec{d}}{r^3} + \frac{3(\vec{d} \cdot \hat{r})\hat{r}}{r^5} \right]_{\text{ret}} , \\ \vec{B}_e &= \frac{\mu_0 c}{4\pi} \left[\frac{\vec{d}'' \times \hat{r}}{r^2} + \frac{\vec{d}' \times \hat{r}}{r^3} \right]_{\text{ret}} .\end{aligned}$$

Zur Untersuchung des Energieflusses werden aus den Feldern \vec{E} und \vec{B} der Poynting-Vektor \vec{S} (Energieflußdichte) und die elektromagnetische Energiedichte w_{em} bestimmt mit

$$\vec{S} = \frac{1}{\mu_0} \vec{E} \times \vec{B} \quad , \quad w_{\text{em}} = \frac{\epsilon_0}{2} \vec{E}^2 + \frac{1}{2\mu_0} \vec{B}^2 \quad .$$

Die expliziten Ausdrücke für den Poynting-Vektor und die Energiedichte lauten:

$$\begin{aligned}\frac{(4\pi)^2 \epsilon_0}{c} \vec{S} &= \frac{1}{r^2} \left[\vec{d}''^2 \hat{r} - (\vec{d}'' \cdot \hat{r})^2 \hat{r} \right] \\ &+ \frac{2}{r^3} \left[(\vec{d}' \cdot \vec{d}'') \hat{r} + (\vec{d}' \cdot \hat{r}) \vec{d}'' - 2(\vec{d}' \cdot \hat{r})(\vec{d}'' \cdot \hat{r}) \hat{r} \right] \\ &+ \frac{1}{r^4} \left[\vec{d}^2 \hat{r} + 2(\vec{d}' \cdot \hat{r}) \vec{d}' - 3(\vec{d}' \cdot \hat{r})^2 \hat{r} + (\vec{d} \cdot \vec{d}') \hat{r} + 2(\vec{d} \cdot \hat{r}) \vec{d}' - 3(\vec{d} \cdot \hat{r})(\vec{d}' \cdot \hat{r}) \hat{r} \right] \\ &+ \frac{1}{r^5} \left[(\vec{d} \cdot \vec{d}') \hat{r} + 2(\vec{d} \cdot \hat{r}) \vec{d}' - 3(\vec{d} \cdot \hat{r})(\vec{d}' \cdot \hat{r}) \hat{r} \right] \quad , \\ 2(4\pi)^2 \epsilon_0 w_{\text{em}} &= \frac{2}{r^2} \left[\vec{d}''^2 - (\vec{d}'' \cdot \hat{r})^2 \right] + \frac{4}{r^3} \left[\vec{d}' \cdot \vec{d}'' - (\vec{d}' \cdot \hat{r})(\vec{d}'' \cdot \hat{r}) \right] \\ &+ \frac{2}{r^4} \left[\vec{d}^2 + \vec{d} \cdot \vec{d}' + (\vec{d}' \cdot \hat{r})^2 - (\vec{d}' \cdot \hat{r})(\vec{d}'' \cdot \hat{r}) \right] \\ &+ \frac{2}{r^5} \left[\vec{d} \cdot \vec{d}' + 3(\vec{d} \cdot \hat{r})(\vec{d}' \cdot \hat{r}) \right] + \frac{1}{r^6} \left[\vec{d}^2 + 3(\vec{d} \cdot \hat{r})^2 \right] \quad .\end{aligned}$$

Die oben bereits erwähnte Einschränkung auf eine feste Dipolrichtung wird an dieser Stelle mit $\vec{d}(ct) = \vec{d}_0 f(ct)$ explizit eingeführt. Damit kann ein einfacher Ausdruck für die zeitlich integrierte Energiestromdichte angegeben werden,

$$\begin{aligned}\frac{(4\pi)^2 \epsilon_0}{c} \int_{-\infty}^t \vec{S}(t') dt' &= \frac{1}{r^2} \left[\vec{d}_0^2 - (\vec{d}_0 \cdot \hat{r})^2 \right] \hat{r} \frac{1}{c} \int_{-\infty}^{ct} [f''(ct')]^2 d(ct') \quad (1.45) \\ &+ \frac{1}{r^3} \left[\vec{d}_0^2 \hat{r} + (\vec{d}_0 \cdot \hat{r}) \vec{d}_0 - 2(\vec{d}_0 \cdot \hat{r})^2 \hat{r} \right] \frac{1}{c} f'^2(ct) \\ &+ \frac{1}{r^4} \left[\vec{d}_0^2 \hat{r} + 2(\vec{d}_0 \cdot \hat{r}) \vec{d}_0 - 3(\vec{d}_0 \cdot \hat{r})^2 \hat{r} \right] \frac{1}{c} f(ct) f'(ct) \\ &+ \frac{1}{r^5} \left[\vec{d}_0^2 \hat{r} + 2(\vec{d}_0 \cdot \hat{r}) \vec{d}_0 - 3(\vec{d}_0 \cdot \hat{r})^2 \hat{r} \right] \frac{1}{2c} f^2(ct) \quad .\end{aligned}$$

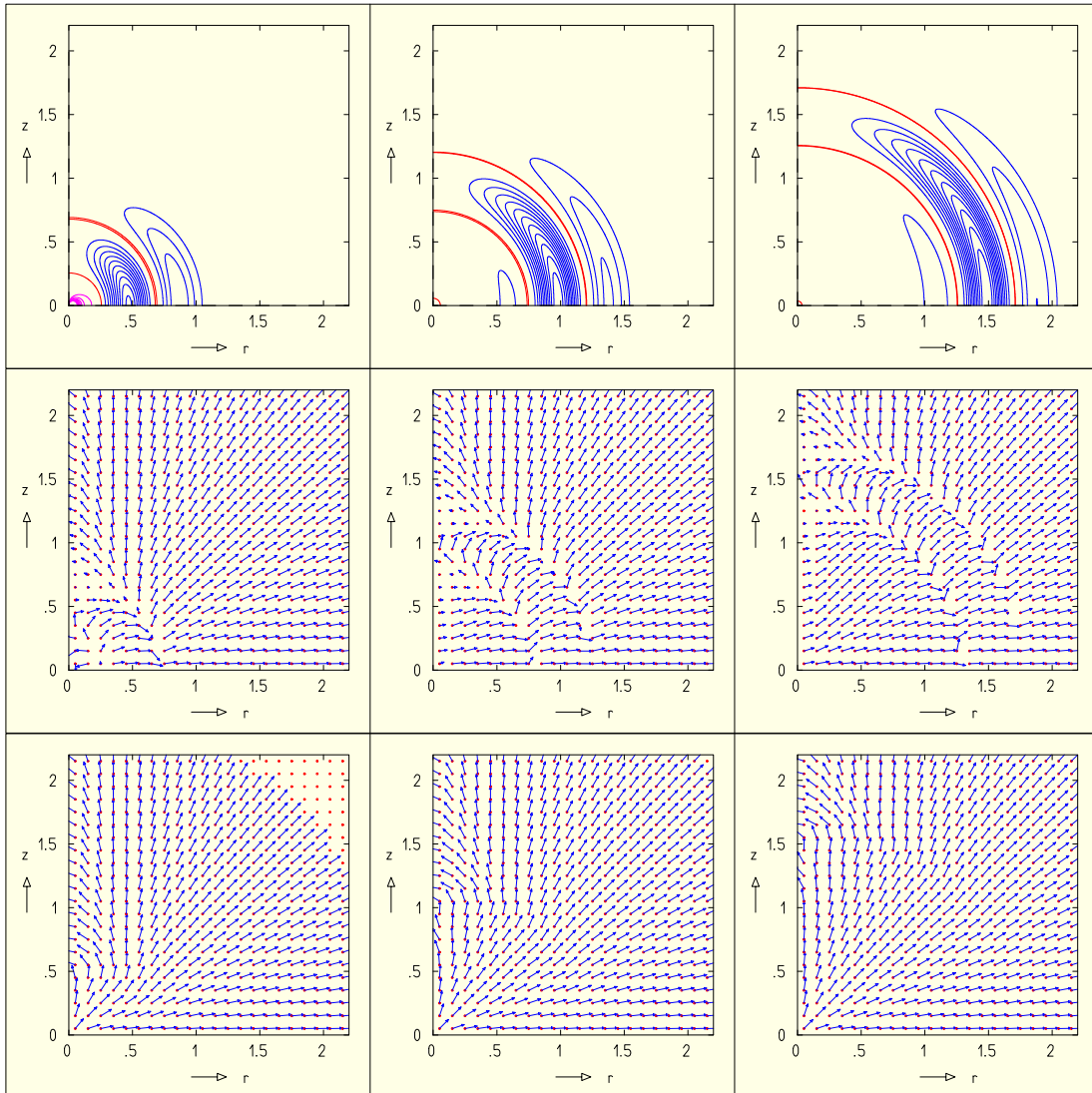


Abbildung 1.4: Strahlender elektrischer Dipol mit gaußscher Zeitabhängigkeit des Dipolmoments. Gleiche Spalten entsprechen gleichen Zeiten: $t = t_0 + i \Delta t$, $i = 0, 1, 2$. Oben: skalierte Radialkomponente des Poynting-Vektors, $r^2 \vec{S} \cdot \hat{r}$. Mitte: auf Eins normierte ($c = 1$) (lokale) Energiegeschwindigkeit $\vec{v} = \vec{S}/w_{\text{em}}$. Unten: Einheitsvektor des integrierten Poynting-Vektors (1.45).

Für einige Zeitabhängigkeiten $f(ct)$ werden in der Folge die in (1.45) auftretenden, f -abhängigen Terme angegeben. Zuerst wird ein zeitlicher Impuls in Form einer Gauß-Funktion betrachtet:

$$f(ct) = e^{-(\omega t)^2/4} \quad , \quad f'(ct) = -\frac{\omega^2 t}{2c} e^{-(\omega t)^2/4} \quad ,$$

$$f''(ct) = \frac{\omega^2}{c^2} \left(\frac{(\omega t)^2}{4} - \frac{1}{2} \right) e^{-(\omega t)^2/4} \quad ,$$

$$[f''(ct)]^2 = \left(\frac{\omega^2}{c^2}\right)^2 \left(\frac{(\omega t)^2}{4} - \frac{1}{2}\right)^2 e^{-(\omega t)^2/2} ,$$

$$\int dt [f''(ct)]^2 = \left(\frac{\omega^2}{c^2}\right)^2 \frac{1}{32\omega} \left[2\omega t (1 - (\omega t)^2) e^{-(\omega t)^2/2} + 3\sqrt{2\pi} \operatorname{erf}(\omega t/\sqrt{2})\right] .$$

Dieser erzeugt im Fernfeld der Abstrahlung einen Dreifachpuls. Als nächstes betrachten wir einen Impuls, bei dem das Dipolmoment von 0 auf $2\vec{d}_0$ monoton anwächst. Ein solcher Fall ist gegeben durch

$$f(ct) = \frac{\sinh \omega t}{\cosh \omega t} + 1 \quad , \quad f'(ct) = \frac{\omega}{c} \frac{1}{\cosh^2 \omega t} \quad ,$$

$$f''(ct) = -2\frac{\omega^2}{c^2} \frac{\sinh \omega t}{\cosh^3 \omega t} \quad , \quad [f''(ct)]^2 = \left(2\frac{\omega^2}{c^2}\right)^2 \frac{\sinh^2 \omega t}{\cosh^6 \omega t} \quad ,$$

$$\int dt [f''(ct)]^2 = \left(2\frac{\omega^2}{c^2}\right)^2 \frac{1}{15\omega} \left(2 + \frac{3}{\cosh^2 \omega t}\right) \frac{\sinh^3 \omega t}{\cosh^3 \omega t} .$$

In diesem wird die minimale Anzahl von zwei Impulsen im Fernfeld erzeugt. Zuletzt betrachten wir eine zeitliche Änderung $f(ct)$, bei der man von 0 beginnend in ein lineares Wachstum für das Dipolmoment übergeht:

$$f(ct) = \ln \cosh \omega t + \omega t \quad , \quad f'(ct) = \frac{\omega \sinh \omega t}{c \cosh \omega t} + \frac{\omega}{c} \quad ,$$

$$f''(ct) = \frac{\omega^2}{c^2} \frac{1}{\cosh^2 \omega t} \quad , \quad [f''(ct)]^2 = \left(\frac{\omega^2}{c^2}\right)^2 \frac{1}{\cosh^4 \omega t} \quad ,$$

$$\int dt [f''(ct)]^2 = \left(\frac{\omega^2}{c^2}\right)^2 \frac{1}{3\omega} \left(2\frac{\sinh \omega t}{\cosh \omega t} + \frac{\sinh \omega t}{\cosh^3 \omega t}\right) .$$

In diesem Fall wird nur ein Impuls im Fernfeld erzeugt. Dafür wächst das Dipolmoment schließlich über alle Schranken.

In Bild 1.4 ist die Abstrahlung eines elektrischen Punktdipols mit gaußscher Zeitabhängigkeit seines Dipolmoments gezeigt. Es gilt $c = 1$. Der Parameter ω besitzt den Wert 2π , und die gesamte Situation ist gegenüber dem Zeitpunkt $t = 0$ um den aus dem Bild erkennbaren Wert von $\Delta t_\phi = -0.5$ phasenverschoben. Zwischen den jeweiligen Teilbildern liegt ein Zeitunterschied von $\Delta t = 0.5$. Deutlich erkennbar in der Darstellung des radial skalierten Poynting-Vektors $r^2 \vec{S}$ ist die Entwicklung der drei Pulse, die radial durch dessen (Quasi-)Verschwinden gekennzeichnet ist. Das Geschwindigkeitsfeld zeigt bei größeren Abständen und hohen Energie(strom)dichten i. w. radial nach außen, wohingegen bei kleinen radialen Strömen die Richtungen variieren, wobei sie insbesondere in der Nähe der z -Achse zuvorderst auf diese hinführen und später von dieser wegweisen. Die integrierte Energiestromdichte zeigt ebenso hauptsächlich radial nach außen, in der Nähe der Achse auch anfänglich auf sie zu und in der Folge von ihr weg.

1.6 Detektorverbindungskurven

Die Detektorverbindungskurven, die zunächst von einem Bahnparameter s abhängen, werden durch die Differentialgleichung (1.36) bestimmt. In Abhängigkeit der Zeit t gibt diese Differentialgleichung vornehmlich die Veränderungsrichtung an – durch frei wählbare Vorfaktoren wird eine Reparametrisierung vorgenommen. Die Größe \vec{I} bestimmt sich zum Zeitpunkt des ersten Arguments, der Ankunftszeit $t(\vec{r})$, die sich aus den Positionen der transformierten Anfangsflächen ergibt, welche den Charakteristiken (1.28) als Lösung der Differentialgleichung (1.26) folgen. Der Algorithmus zur Bestimmung der Detektorverbindungskurven und ihrer Argumente wird in den Abschnitten 1.6.1 und 1.6.2 näher beschrieben. Zunächst soll aus der Kenntnis der (lokalen) Ankunftszeitfunktion $t(\vec{r})$ eine lokale Beziehung zwischen Bahnparameter s und Zeit t hergestellt werden.

Man verlangt, daß die Projektionen der (infinitesimalen) Schritte entlang der Kurven auf die Normalenrichtung der Flächen- oder Linienelemente für Bewegungen entlang der Stromlinien und entlang der Detektorverbindungskurven einander entsprechen, siehe Bild 1.5:

$$(\vec{v} \Delta t) \cdot \hat{n} = (\vec{I} \Delta s) \cdot \hat{n} \quad .$$

Diese Forderung ist mit der Differentialgleichung (1.39) verträglich bzw. folgt aus ihr, wobei der Normaleneinheitsvektor \hat{n} dem normierten Flächennormalenvektor $\vec{\lambda}_0(s, \underline{s})$ entspricht und die Geschwindigkeit \vec{v} sich durch \vec{j}/ρ_0 darstellt. Die sich daraus ergebende Beziehung zwischen Bahnparameter und Zeit lautet

$$\frac{\Delta s}{\Delta t} = \frac{\vec{v} \cdot \hat{n}}{\vec{I} \cdot \hat{n}} \rightarrow \frac{ds}{dt} \quad . \quad (1.46)$$

Ist die Ankunftszeit auf der Anfangsfläche bzw. Anfangslinie durch eine Konstante gegeben, so ist sie auch für spätere Flächen bzw. Linien konstant, und damit kann der Normalenvektor \hat{n} in der Form

$$\hat{n} = \pm \frac{\vec{\nabla} t(\vec{r})}{|\vec{\nabla} t(\vec{r})|}$$

mit (lokal) zu wählendem Vorzeichen geschrieben werden. Die Orientierung von \hat{n} ist durch die Wahl auf der Anfangsfläche und die (stetige) Zeitentwicklung vorgegeben.

Zur Parametrisierung einer Geraden im Phasenraum sei n_x, n_p ein dimensionsbehafteter Normalenvektor, und $\delta x, \delta p$ seien (beliebige) Achsenabschnitte der Geraden. Daraus ergibt sich als Geradengleichung

$$n_x \delta x + n_p \delta p = 0$$

mit dem Normalenvektor parametrisiert durch

$$n_x = \frac{\mu}{\delta x} \quad , \quad n_p = -\frac{\mu}{\delta p} \quad .$$

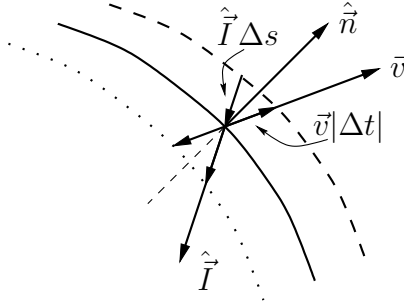


Abbildung 1.5: Allgemeine Situation der Bewegung einer Detektorfläche im Geschwindigkeitsfeld \vec{v} der Stromdichte einer physikalischen Größe. In einem Zeitschritt Δt wird die Linie auf eine neue Linie unter der lokalen Verschiebung $\vec{v} \Delta t$ abgebildet, $\Delta t > 0$ für die gestrichelte Kurve, $\Delta t < 0$ für die gepunktete Kurve. Für die Integration von Detektorverbindungskurven und positive Projektionen, $\vec{I} \cdot \hat{n} > 0$, ist $\Delta t > 0$, im umgekehrten Fall, $\vec{I} \cdot \hat{n} < 0$, wie gezeichnet, gilt $\Delta t < 0$.

Mit den Stromdichten J_x, J_p und den zugehörigen zeitintegrierten Stromdichten I_x, I_p erhält man

$$(J_x n_x + J_p n_p) \Delta t = (I_x n_x + I_p n_p) \Delta s \quad ,$$

und als Beziehung zwischen Bahnparameter und Zeit ergibt sich

$$\frac{\Delta s}{\Delta t} = \frac{J_x \delta p - J_p \delta x}{I_x \delta p - I_p \delta x} \rightarrow \frac{ds}{dt} \quad .$$

1.6.1 Algorithmische Bestimmung der Detektorverbindungskurven

In den betrachteten Beispielen, vgl. Abschnitte 1.4 und 1.5, gehen wir von einfachen physikalischen Systemen aus, wie dem freien quantenmechanischen Teilchen in zwei Dimensionen, welches durch ein gaußsches Wellenpaket beschrieben wird und dessen Wahrscheinlichkeits- und Energietransport betrachtet wird, und wie dem strahlenden klassischen elektrischen Dipol, dessen Energietransport untersucht wird. Diese Systeme sind entweder zweidimensional oder können effektiv aufgrund der gewählten Symmetrie als solche betrachtet werden. Die Anfangszeitlinien (vgl. Anfangszeitflächen aus Abschnitt 1.3) im Fall des gaußschen Wellenpakets werden zu Geraden parallel zur y -Richtung gewählt. Für den Dipol handelt es sich um konzentrische Kugeln (bzw. Kreise) um den Ort des Dipols. Die Zeit auf den Anfangszeitlinien wird zu einer Konstante gesetzt.

Eine Möglichkeit der Bestimmung der Detektorverbindungskurven besteht z. B. in der Diskretisierung der Anfangsline und der Verwendung der zeitlichen Entwicklung der Stromtrajektorien sowie der diskreten schrittweisen Integration

der Detektorverbindungskurven auf der diskretisierten Menge zeitlich veränderlicher Koordinaten. Der Speicher- und Rechenaufwand wächst bei höheren geforderten Genauigkeiten stark an, weil sowohl die Stützstellendichte auf der Anfangslinie erhöht wie auch die Schrittweite der kombinierten zeitlichen und parameterbehafteten Integration von Stromtrajektorien- und Detektorverbindungslinienschar i. w. linear verkleinert wird. Der hohe Rechenaufwand ergibt sich am Ende dadurch, daß viel mehr Linien berechnet als schließlich dargestellt werden. Die in der Folge auftretenden Komplizierungen wie die Linienumkehr oder die Zeitumkehr sind an dieser Stelle noch nicht berücksichtigt.

Der gewählte Algorithmus berechnet jeweils eine Detektorverbindungskurve zu einer festen Anfangsbedingung auf der Anfangslinie. Durch eine bestimmte Wahl der differentiellen Beziehung zwischen Zeit und Bahnparameter (1.47), siehe unten, wird letzterer festgelegt. Für jeden Parameterschritt der numerischen Integration der Differentialgleichung (1.36) ist zunächst der zugehörige Zeitpunkt an diesem Raumpunkt zu bestimmen. Dazu wird ausgehend von einem approximativ festgelegten Zeitpunkt (z. B. der Zeit des vorhergehenden Punktes) eine zeitliche Rückwärtsintegration entlang einer am dortigen Punkt endenden Stromtrajektorie durchgeführt, die den zugehörigen Anfangspunkt der Trajektorie liefert. Durch eine sich anschließende Iteration wird ein zweiter Zeitpunkt gesucht, dessen Anfangspunkt auf der anderen Seite der Anfangslinie liegt. Damit kann bezüglich einer geeigneten Koordinatendifferenz zwischen approximativem Anfangspunkt und Anfangslinie ein Nullstellensuchverfahren verwendet werden, welches den gesuchten Zeitpunkt liefert. Eine detailliertere Beschreibung dieses Verfahrens ist in Abschnitt 1.6.4 angegeben. Mit Hilfe dieses Zeitpunkts wird der Wert der Stromdichte und der integrierten Stromdichte an dem betrachteten Raumpunkt der Iteration bestimmt. Die Größe der Werte, die den nächsten Schritt bestimmt, enthält auch die Winkel zwischen den Strömen und dem Normalenvektor auf der Linie an diesem Raumpunkt, siehe (1.47). Der Normalenvektor ergibt sich direkt aus dem Tangentenvektor. Letzterer wird dadurch bestimmt, daß der Anfangspunkt der Stromtrajektorie auf der Anfangslinie variiert wird und so eine numerische Differentiation der Endkoordinaten durchgeführt wird. Dieses Vorgehen wird näher in Abschnitt 1.6.3 beschrieben. Die Ortsvektoren der Detektorverbindungskurven werden für äquidistante, extern vorgegebene Zeitpunkte berechnet. Da die Integration bezüglich des durch (1.47) definierten Bahnparameters mit vorher zu bestimmenden Parameterintervallen erfolgt, wird eine Iteration an den Kurvenpunkten zur hinreichend genauen Eingrenzung des jeweils vorgegebenen Zeitpunkts erforderlich, siehe Abschnitt 1.6.2. Die Integration endet bei Erreichen des Endzeitpunkts.

Die Beziehung (1.46) zwischen Zeit und Kurvenparameter wird singulär, wenn das Skalarprodukt zwischen Normalenvektor und Stromdichte oder zwischen Normalenvektor und zeitlich integrierter Stromdichte verschwindet. Die sich nach (1.46) direkt ergebende Form der skalierten Kurventangente der Detektorverbindungskurve lautet

$$\hat{I} \frac{ds}{dt} \rightarrow \frac{\vec{I}}{|\vec{I}|} \frac{\vec{j} \cdot \hat{n}}{\vec{I} \cdot \hat{n}} .$$

Diese Form hat jedoch den Nachteil, daß bei einem Vorzeichenwechsel von $\vec{I} \cdot \hat{n}$ eine Singularität in der Parametrisierung auftritt, die die Fortführung der Kurve numerisch erschwert. Stattdessen liefert die nichtsinguläre Form

$$\hat{I} \frac{ds}{dt} \rightarrow \frac{\vec{I}}{|\vec{I}|} (\vec{j} \cdot \hat{n}) \left[\frac{1}{\sqrt{I_0^2 + (\vec{I} \cdot \hat{n})^2}} \right] , \quad I_0 = \text{const} \quad , \quad (1.47)$$

einen glatten Übergang beim Vorzeichenwechsel der Projektion der integrierten Stromdichte auf den Liniennormalenvektor. Dieser Übergang bestimmt den Wechsel von der Vorwärts- zur Rückwärtsentwicklung der Detektorverbindungskurve in der Zeit. Die betrachtete Projektion stellt eine Liniendichte auf der sich zeitlich bewegenden Detektorlinie dar. Ein negativer Wert beschreibt einen Detektor als Quelle einer physikalischen Größe entgegen der üblichen Interpretation als Senke. Letztere Eigenschaft ist in ausschließlicher Weise nur durch die explizite Beschreibung des Problems als Wechselwirkung mit dem Detektor zu erreichen, wobei dissipative Terme die Absorption leisten sollten. Eine Nullstelle des Zählers durch $\vec{j} \cdot \hat{n}$ beschreibt einen Umkehrpunkt einer Detektorverbindungskurve: Wenn die integrierte Stromdichte in der Nähe einer Nullstelle sich nur wenig ändert, läuft die Kurve wegen des sich nur ändernden Vorzeichens in sich zurück. Diese Umkehrung muß explizit durchgeführt werden, weil die unten beschriebene numerische Integration an der Nullstelle anhält: Der Grund liegt darin, daß das Zurücklaufen an solchen Stellen durch die explizite globale Vorzeichenanpassung in (1.36) bzw. daraus folgend in (1.47) zu bewerkstelligen ist. Der in eckigen Klammern angeführte Faktor wird auch zur Skalierung des Tangentenvektors, d. h. hier auch zur impliziten Steuerung der Integrations-schrittweite verwendet. Die Ablaufsteuerung der numerischen Integration wird in Abschnitt 1.6.2 beschrieben.

Die Rechnungen werden in doppelter Genauigkeit durchgeführt. Im IEEE-Standard bedeutet dies eine relative Genauigkeit in der Zahlendarstellung der Gleitkommazahlen von ca. $2 \cdot 10^{-16}$. Die Programmierung des Algorithmus erfolgte in FORTRAN77 (Standard) mit einer Länge des Codes von knapp 3000 Zeilen.

1.6.2 Die Hauptroutine

Diese Unteroutine dient der Steuerung und Berechnung des nächsten (äquidistanten) externen Zeitschritts der Integration von Detektorverbindungskurven. Je nach physikalischem System werden die Anfangslinien des Detektors gewählt, Geraden parallel zur y -Achse für sich in x -Richtung bewegende, freie quantenmechanische Wellenpakete und Kreise für den strahlenden zeitabhängigen elektrischen Dipol. Die Anfangsbedingungen der Detektorverbindungskurven werden

allgemein äquidistant zwischen zwei Punkten auf der Anfangslinie gewählt. Im Fall der Wahrscheinlichkeitsdichte des freien zweidimensionalen quantenmechanischen gaußschen Wellenpakets können im Rahmen von bis zu N (hier 256) Stützstellen einer numerischen Ortsintegration die Anfangsbedingungen so gewählt werden, daß zwischen zwei benachbarten Kurven jeweils die gleiche Menge an Wahrscheinlichkeit durch die Anfangslinie geflossen ist. (Des weiteren können individuell Anfangsbedingungen zu einer späteren Zeit bezüglich einer bestimmten Anfangslinie gesetzt werden.)

Zu Beginn wird überprüft, ob in einem vorhergehenden Durchgang ein Zeitpunkt gesetzt wurde, zu dem die Detektorverbindungskurve fortgesetzt wird. Ein solcher Zeitpunkt wird z. B. bei der Umkehrung einer Kurve gesetzt, da der exakte Umkehrpunkt aus numerischen Gründen nicht zugänglich ist, siehe unten. Liegt der in diesem Schritt zu berechnende Endzeitpunkt vor dem gespeicherten, so werden die Koordinaten des vorhergehenden Durchlaufs verwendet. Bei einem neuen Kurvenansatz (Anfangspunkt, Kurvenumkehrpunkt, Zeitumkehr) wird die Projektion der integrierten Stromdichte auf die Liniennormale bestimmt. Für eine negative Projektion wird der Liniensstil gewechselt, der derzeitige Punkt gezeichnet und der nächste Zeitpunkt um einen externen Zeitschritt verringert.

Die Iteration zur Berechnung des nächsten Punktes auf der Detektorverbindungskurve ist als Schleifenkomplex mit verschiedenen Einsprungstellen realisiert. Darüber hinaus wird innerhalb der Schleifen nach einer Reihe von Operationsmoden unterschieden, die sich durch das Verhalten der Kurve während der Integration ergeben und durch verschiedene Variablen gesteuert werden. Auf diese verschiedenen Moden wird in der Folge explizit hingewiesen. Vor der Iteration werden die Variablen auf ihre Anfangswerte gesetzt.

An dieser Stelle befindet sich eine Schleifeneinsprungstelle **(A)**. Zuerst wird ein Schätzwert für den, dem Zeitschritt entsprechenden, momentanen Parameterschritt bestimmt, als Produkt aus dem Betrag der sich aus der momentanen Stromdichte ergebenden Geschwindigkeit und dem Zeitschritt. Mit diesem Wert werden Parameterwerte initialisiert, die die iterativ zu ermittelnden Grenzen für eine nachfolgend durchzuführende Intervallschachtelung darstellen.

Nach der sich hier befindlichen Schleifeneinsprungstelle **(B)** wird die Integrationsschrittweite der numerischen Integration initialisiert zu einem Fünftel der momentanen Parameterintervalllänge. Es folgt Schleifeneinsprungstelle **(C)**, an der, abhängig von einer Steuervariable, gespeicherte Kurven- und Zeit-Umkehrpunkte, die während des vorangegangenen Iterationsdurchlaufs innerhalb des derzeitigen Zeitintervalls auftraten, gezeichnet werden können. An der hier gesetzten Schleifeneinsprungstelle **(D)** wird die Integrationsschrittweite auf einen Wert unter 0.1 begrenzt. Nach dem Setzen einiger Steuervariablen wird ein numerischer Integrationsschritt für eine Detektorverbindungskurve (mit den jeweils aktuellen Parametern) durchgeführt.

Falls die Integration wegen einer Kurvenumkehr (bedingt durch eine Nullstelle von $\vec{j} \cdot \hat{n}$) abgebrochen wurde, wird zunächst eine Steuervariable für unterbrochene Integration gesetzt. Im Fall des Standardmodus wird die entsprechende Parameterintervallgrenze auf den Umkehrpunkt reduziert, und die Koordinaten werden auf diejenigen vor dem letzten Schritt zurückgesetzt. Dies wird deshalb unternommen, um den Umkehrpunkt durch einen vollständigen, nicht abgebrochenen Integrationsschritt zu bestimmen. Der zweite hier betrachtete Fall des Anhaltens einer Integration kann (aus numerischen Gründen) während der Fortsetzung der Kurve nach dem Umkehrpunkt auftreten. An dieser Stelle werden verschiedene gespeicherte Punkte des zum Umkehrpunkt hinlaufenden Kurvenastes (in der Reihenfolge ihres Parameterabstandes zum Umkehrpunkt, Berechnung dieser wird anschließend erläutert) verwendet, um zu einem entsprechend später gewählten Zeitpunkt von dort aus die Kurve in umgekehrter Richtung fortzusetzen. Die Koordinaten, Integrationsschrittweiten und Parameterintervalle werden der Situation angepaßt gesetzt. Danach springt man zur Schleifeneinsprungstelle (B).

Falls zuvor eine Umkehrung aufgetreten ist, wird an dieser Stelle eine Reihe von Punkten in der Annäherung an die Umkehrstelle berechnet. Anfangszeitpunkt, Anfangskoordinaten und zugehörige Parameter dieser Reihe bestimmen sich aus den folgenden Bedingungen: Liegt der Umkehrpunkt zeitlich mehr als ein Zehntel der externen zeitlichen Schrittweite vom letzten erfolgreich abgeschlossenen Integrationsschritt entfernt, so wird dieser der Startpunkt; oder ist die Zahl der bereits berechneten (externen) Punkte größer als 1 (einschließlich Anfangspunkt bzw. entsprechend nach einer Umkehrung, d. h. mindestens ein Integrationsschritt ist bereits erfolgt), so wird der Anfangspunkt des letzten erfolgreich abgeschlossenen Integrationsschritts als neuer Startpunkt verwendet; ansonsten wird wie im ersten Fall der letzte Punkt genommen. Für den gewählten Punkt wird die zugehörige Zeitdifferenz, das Parameterintervall und der approximative Zeitpunkt für die Fortsetzung bei Bewegungsumkehr gesetzt. Die volle Parameterdistanz bis zum Umkehrpunkt wird für die Annäherung an diesen bei jedem Schritt im Verhältnis 3 : 1 geteilt, so daß jeweils über 3/4 des verbleibenden Parameterbereichs integriert wird. Der Abschneideparameter ist das 10^{-6} fache der anfänglichen Intervalllänge. Zum Schleifeneinsprung (**A2**) wird die Parameterintervalllänge wie beschrieben auf 3/4 der verbleibenden Parameterintervalllänge gesetzt, und eine vorläufige Integrationsgenauigkeit wird festgelegt zu einem Zehntel der Intervalllänge. Danach wird die Integrationsgenauigkeit wie vorher auf 0.1 nach oben beschränkt, Steuervariablen werden initialisiert und die Integration durchgeführt. Bricht die Integration ab, so wird auch diese Suche nach Punkten in der Nähe des Umkehrpunktes beendet.

Im Fall eines erfolgreich durchgeführten Integrationsschritts (in Annäherung an den Umkehrpunkt) werden ggf. Kurventeile dieser Iteration gezeichnet, und die verbleibende Intervalllänge des Kurvenparameters wird auf ein Viertel seines Wertes reduziert. Nun wird zunächst (außerhalb der Integration) die zum mo-

mentan berechneten Endpunkt der Kurve gehörende Zeit t_{Ende} berechnet. Mit dieser und dem vorher bestimmten Zeitpunkt $t_{\text{Umk.}}$ der Kurvenumkehr wird der approximative Zeitpunkt $(2t_{\text{Umk.}} - t_{\text{Ende}})$ der Kurvenfortsetzung festgelegt, der als Anfangswert für die darauffolgende Berechnung der zum betrachteten Endpunkt als Anfangspunkt der Kurvenfortsetzung gehörenden Zeit $t_{\text{Anf.}}$ dient. Falls diese Zeitbestimmung erfolgreich war, d. h. die Stromtrajektorie nicht angehalten ist und die Differenz zum entsprechenden Zeitpunkt t_{Ende} der Kurve vor der Umkehrung am gleichen Ort nicht zu klein ist, werden die Größen der Koordinaten, des Endzeitpunkts, des Fortsetzungszeitpunkts und des Parameters gespeichert. Für die Kurvenfortsetzung wird anfänglich jeweils die gleiche Intervalllänge wie für den Hinweg verwendet. Es folgt der Sprung zum Schleifenbeginn (A2) wenn, wie oben bereits beschrieben, die verbleibende Intervalllänge größer als das 10^{-6} fache der Anfangsintervalllänge ist. Ansonsten werden die zuletzt berechneten Koordinaten und Zeitpunkte umkopiert und die Iteration zur Fortsetzung nach der Umkehrung initialisiert, worauf der Sprung zum Schleifeneintrittspunkt (D) folgt.

Wenn zuvor die Integration der Kurve unterbrochen wurde, so werden die ersten zu speichernden Anfangskoordinaten wie die Anfangszeit und der zugehörige Parameter gespeichert. Falls der momentan berechnete Zeitpunkt später als der zu berechnende Endzeitpunkt des Iterationsschritts liegt, hier gegebenenfalls wegen eines Zeitsprungs bei der Umkehrung, finden die Koordinaten des vorhergehenden Zeitpunkts Verwendung. In diesem Fall wird die gesamte Iteration beendet für diesen Schritt.

Falls (je nach Zeitrichtung) der Anfangs- bzw. Endpunkt des Zeitintervalls dieses Iterationsschritts der Detektorverbindungskurve zum erstenmal erreicht oder überschritten wurde, werden die zugehörigen Variablen zurückgesetzt, die derzeitigen Koordinaten auf die gespeicherten gesetzt und die Parameterintervalllänge auf die vor dem Endpunkt sowie eine Restintervalllänge bestimmt, worauf ein Sprung an die Schleifeneintrittsstelle (D) folgt. Die zuvor verwendeten Parameterwerte ergeben sich dabei aus gespeicherten Werten der Bestimmung des Endes der Integration aus Abschnitt 1.6.3. Diese Aufteilung erfolgt auf diese Weise, um das Parameterintervall durch möglichst wenige wiederholte Integrationen einzugrenzen. Die soeben erwähnte Erkennung des Endes der Integration wird ab diesem Punkt für die weitere Bestimmung dieser Parameterintervallgrenze ausgesetzt.

Falls die Zeitrichtung fortschreitend ist und der momentane Zeitpunkt vom zu berechnenden Endzeitpunkt weniger als 10^{-9} abweicht oder eine entsprechende Bedingung bei rückschreitender Zeitrichtung gilt, so werden die Koordinaten gesichert, und der letzte Zeitpunkt wird zum momentanen gesetzt. Ebenso wird für nicht unterbrochene Integration die integrierte Parameterintervalllänge aktualisiert. Ansonsten, falls noch kein Nullstellenintervall gefunden ist und der momentane Zeitpunkt zwischen Anfangs- und Endpunkt des für diesen Schritt geltenden Zeitintervalls liegt, werden die folgenden Programmteile ausgeführt. Für nicht unterbrochene Integration wird die integrierte Parameterintervalllänge

aktualisiert. Wenn eine Restintervalllänge als Steuervariable gesetzt ist, wird die verbleibende Parameterintervalllänge zu dieser Länge gesetzt und ersterer Wert auf 0 zurückgesetzt. Ansonsten findet im Fall einer nicht verschwindenden Anzahl gespeicherter zeitlicher Umkehrpunkte keine Aktion statt. Oder, falls der Abstand des alten Zeitpunkts zum Endzeitpunkt (je nach Zeitrichtung) größer als der dreifache Zeitabstand vom alten zum momentanen Zeitwert ist, wird die Parameterintervalllänge verdoppelt. Ansonsten, falls in zeitlicher Vorwärtsrichtung der Zeitabstand vom momentanen Zeitpunkt zum alten Wert größer als die halbe Zeitdifferenz vom Endzeitpunkt zum alten Wert ist und die Differenz von zu berechnendem Endzeitpunkt und momentanem Zeitpunkt größer als $100 \cdot 10^{-9}$ ist, wird die verbleibende Parameterintervalllänge auf das 0.98fache der Größe des linear bezüglich der Zeit extrapolierten Wertes des verbleibenden Parameterintervalls gesetzt. Im Fall zeitlicher Rückwärtsrichtung wird ein entsprechendes Verfahren angewandt. Danach wird der neue Anfangspunkt zum momentanen Endpunkt gesetzt in Koordinaten und Zeit. Die Steuervariable für unterbrochene Integration wird zurückgesetzt (falls gesetzt), die Steuervariable zum Zeichnen zusätzlicher Kurvenpunkte gesetzt und ein Sprung zum Schleifeneintrittspunkt (C) durchgeführt.

Ansonsten wird die Restintervalllänge (Steuervariable) zu 0 gesetzt. Falls das Zeitintervall zur Nullstellensuche noch nicht eingegrenzt wurde, wird nun die entsprechende Steuervariable gesetzt wie auch die Parameter-, Zeit- und Koordinatenwerte. Sonst wird der folgende Block ausgeführt. Falls der momentane Zeitpunkt außerhalb des für diesen (externen) Schritt geltenden Zeitintervalls liegt, wird der intervallbegrenzende Endzeitpunkt zum momentan Wert des berechneten Endzeitpunkts gesetzt wie auch die Parameterintervalllänge zum Wert der momentanen Länge. Danach erfolgt das Zurücksetzen der momentanen Startkoordinaten auf die gespeicherten, vorhergehenden Werte. Im anderen Fall wird der neue Anfangszeitpunkt wie der Zeitpunkt des Intervallanfangs auf den momentanen Wert des Endzeitpunkts gesetzt. Für nicht unterbrochene Integration wird die letzte integrierte Parameterintervalllänge um das berechnete Stück vergrößert. Die neue Parameterintervalllänge ergibt sich aus der alten verringert um die momentane Parameterintervalllänge, und die neuen Anfangskordinaten werden zu den momentanen Endkoordinaten gesetzt. Am Ende des Blocks wird die Steuervariable zum Zeichnen zusätzlicher Kurvenpunkte gesetzt. Falls die Zahl der inzwischen aufgetretenen zeitlichen Umkehrungen verschwindet, wird zur Nullstellenfindung für zeitliche Vorwärts- und Rückwärtsrichtung der Intervalllängenbruchteil linear interpoliert, wobei an den Rändern eine Begrenzung des Bruchteils auf das Intervall $[0.1, 0.9]$ erfolgt. Ansonsten wird der Bruchteil zu Eins gesetzt. Die neue Intervalllänge wird zum obigen Bruchteil der momentanen Länge berechnet, wonach der Sprung zum Schleifeneintrittspunkt (C) erfolgt.

Schließlich werden die Koordinaten und Zeiten mit den momentanen zu denen des letzten und vorletzten (externen) Schritts umgespeichert. Danach werden Verbindungen zu und zwischen den Umkehrpunkten innerhalb des momentanen

Schritts gezeichnet. Der nächste Block wird im Falle zeitlicher Rückwärtsentwicklung oder bei erneuter Vorwärtsentwicklung bei Zeitpunkten vor dem extern vorgegebenen ausgeführt. Dabei wird gegebenenfalls zunächst eine (Poly-)Marke mit den jeweils geeigneten Linienattributen gezeichnet. Der momentane Zeitpunkt wird gespeichert, und der nächste Zielzeitpunkt externer Schrittweite bei autonomem Durchlauf zu Zeiten vor dem momentanen externen Zeitpunkt wird bestimmt. Darauf springt man am Blockende zur Schleifeneintrittsstelle (A). Am Ende wird der berechnete Endzeitpunkt gespeichert, und die Koordinaten bilden das Resultat der Routine.

1.6.3 Integration der Stromdichten

Dieser Programmteil besteht aus einer Übergaberoutine für die CERN-Bibliotheksroutine [39] zur numerischen Integration einer n -dimensionalen gewöhnlichen Differentialgleichung erster Ordnung mittels eines modifizierten Runge-Kutta-Verfahrens, vgl. auch Abschnitt 2.11. Der übergebene Kurven-Integrationsparameter wird nur benötigt zur Bestimmung der (relativen) momentanen Position während der numerischen Integration, wird aber für die Auswertung der Funktion ignoriert, weil sich der Zeitpunkt indirekt aus dem ebenfalls übergebenen Ort (x, y) ergibt, siehe Abschnitt 1.6.4. Beim ersten Einsprung einer neuen Kurven-Integration werden die anfängliche Zeit und der anfängliche Kurvenparameter gespeichert.

Falls die Berechnung einer einem Ort zugehörigen Zeit während dieser Kurven-Integration fehlschlägt, vgl. Abschnitt 1.6.4, oder falls die vorgegebene Endzeit erreicht wird, werden die Ströme nicht neu integriert, sondern die Kurven-Integration wird dadurch dem Ende zugeführt, daß die letzten gespeicherten Funktionswerte als konstantes Ergebnis an die aufrufende Integrationsroutine übergeben werden. Zur Berechnung der zugeordneten Zeit innerhalb einer Kurven-Integration wird, abhängig von der Übereinstimmung der Werte der Kurvenparameter, der zuletzt berechnete Zeitwert und ansonsten die übergebene Zeit als Anfangswert für die Berechnung der zugeordneten Zeit verwendet. Deren Berechnung wird an dieser Stelle durchgeführt. Im Falle einer nicht erfolgreichen Berechnung werden, wie oben beschrieben – unter Abbruch der Integration, die letzten erfolgreich berechneten Werte verwendet.

Zur Erkennung des (noch nicht erreichten) Endes der numerischen Integration wird im Fall positiver Zeitrichtung geprüft, ob der momentane Zeitwert kleiner als die Endzeit vermehrt um $3 \cdot 10^{-13}$ ist. Ist dies der Fall, so wird der momentane Parameterwert auch extern gespeichert. Ansonsten wird neben der externen Speicherung des momentanen Parameterwertes eine Steuervariable gesetzt, die in der darüberliegenden Hauptroutine den Programmablauf modifiziert. Damit wird einerseits der Parameterwert kurz vor dem bzw. am Endzeitpunkt und andererseits der Parameterwert direkt nach diesem gespeichert. Eine ähnliche Abfrage und Steuerung erfolgt im Fall negativer Zeitrichtung.

Für den Fall des zweidimensionalen quantenmechanischen gaußschen Wellenpakets sind die Dichten und Ströme in Abschnitt 1.4 angegeben. Bei dem Betrag nach großen Zeiten wird das Argument der Gauß-Funktion konstant: $-m^2 \vec{v}_0^2 / (\hbar^2 \sigma_k^2)$. Das asymptotische Verhalten bestimmt sich daher aus den Vorfaktoren und ist im Fall von Wahrscheinlichkeitsdichte und zugehöriger Stromdichte $\sim t^{-2}$ bzw. $\sim t^{-3}$. Eine analytische Zeitintegration der Stromdichte gestaltet sich daher schwierig. Die numerische Integration wird aufgrund des langsamen asymptotischen Abfalls in zwei Teile aufgespalten. Der eine Teil der Zeitintegration wird von einem negativen Konstantwert aus, der sich aus den Parametern des Wellenpakets ergibt, bis zum Endzeitpunkt in der Variable t durchgeführt. Für den anderen Teil ergibt sich mit der Darstellung $\int_{-\infty}^{t_c} f_c(t) t^{-n} dt$ mit $\lim_{t \rightarrow -\infty} f_c(t) =: f_c \neq 0$ und der Substitution $t = -\tau^\alpha$, $\alpha < 0$: $(-\alpha) \int_0^{(-t_c)^{1/\alpha}} f_c(-\tau^\alpha) \tau^{-\alpha(n-1)-1} d\tau$. Die numerische Integration wird z. B. dann problemlos, wenn der τ -abhängige Faktor im Integranden zu Eins wird, also $\alpha = -1/(n-1)$ ($= -1/2$ für $n = 3$) gilt. Sie wird mit Hilfe der CERN-Routine [36] durchgeführt, wobei die Genauigkeit auf den Wert 10^{-13} festgelegt wird. Da die Koordinaten der Stromtrajektorien in diesem Fall unabhängig voneinander sind, vgl. Abschnitt 1.4, bleibt der ursprüngliche Tangential-Einheitsvektor der Anfangslineie, hier $\hat{n} = \vec{e}_y$, während der Bewegung erhalten.

Im Fall des strahlenden elektrischen Dipols werden die Dichten und Ströme entsprechend den analytischen Ausdrücken aus Abschnitt 1.5 berechnet. Die Berechnung des zum Ort gehörenden Zeitpunkts erfolgt nach Abschnitt 1.6.4 durch zeitliche Rückwärtsintegration entlang der Stromtrajektorien. Zur vorläufigen approximativen Berechnung des Tangentenvektors der Endlinie im betrachteten Punkt wird der Anfangspunkt der Stromtrajektorie auf der anfänglichen Kreislinie um einen kleinen Winkel von $5 \cdot 10^{-7}$ in die beiden Richtungen steigender und fallender Winkel gedreht. Mit entsprechenden Setzungen für die Integrationsgenauigkeit werden die Endpunkte der zugehörigen Trajektorien mittels Vorwärtsintegration bestimmt und deren normierte Differenz gebildet. Mit dem dazu orthogonalen Liniennormalenvektor wird die normierte zeitintegrierte Stromdichte skalar multipliziert zur Erlangung von $\hat{I} \cdot \hat{n}$. Ist der Betrag dieser Projektion kleiner als 0.1, so wird der Tangentialvektor unter Verwendung der numerischen Differentiationsroutine [40] der CERN-Bibliothek genauer berechnet, wobei x - und z -Komponente nacheinander berechnet werden. (Die im Durchlauf für die x -Komponente bereits berechneten z -Werte können gespeichert und für die Differentiation der z -Komponente aus Gründen der Zeitersparnis abgerufen werden.) Der nun mit erhöhter Genauigkeit berechnete Tangentialvektor ersetzt den obigen, in einfacherer Weise berechneten. Die Zweiteilung der Berechnung von \hat{n} sowie die Wahl der numerischen Parameter bzw. Schritte erfolgte semi-empirisch zur Optimierung der Programm-Ablaufgeschwindigkeit unter Wahrung der angestrebten Integrationsgenauigkeit. Eine ungenaue Bestimmung des Richtungsvektors bei kleinen Projektionen erhöht z. B. die benötigte Zahl der Integrations-

schritte im selbst-adaptiven Prozeß, vgl. Abschnitt 2.11, der numerischen Integration der Detektorverbindungskurven.

Die Fälle der verschiedenen Energiedichten quantenmechanischer Wellenpakete, vgl. Abschnitt 1.4, enthalten Elemente aus beiden vorher genannten Beispielen. Da die (kinetischen) Energiedichten und deren Stromdichten für den Betrag nach große Zeiten mit höheren Potenzen abfallen, wäre gegenüber dem Fall der Wahrscheinlichkeitsdichte (oben) ein anderer Exponent α im substituierten Integral der geteilten Zeitintegration angebracht. Aus Gründen der Einfachheit wurde aber der gleiche Exponent $\alpha = -1/2$ gewählt, mit dem Nebeneffekt, daß $f_c = 0$ gilt (jeder Faktor $1/t$ führt dort zu einem Faktor $-\sqrt{t}$). Nach der Bestimmung der Anfangszeit und der Anfangskoordinaten wird der Normalenvektor zur transformierten Anfangslinee entsprechend dem Vorgehen bei der Dipolabstrahlung (oben) berechnet. Die Verschiebungen auf der Anfangslinee haben hier die Form $\Delta y = \pm \max(y_c, |y|) \cdot 10^{-6}$, $y_c = \text{const}$. Eine gegebenenfalls anfallende numerische Differentiation erfolgt analog zum obigen Beispiel des Dipols.

Die gebildeten Skalarprodukte des Liniennormalenvektors mit der momentanen und integrierten Stromdichte zur Bestimmung des Ausdrucks (1.47) werden für den ersten Punkt der Integration gespeichert wie auch die Werte des jeweils beendeten Durchlaufs. Wenn die Projektion der integrierten Stromdichte auf den Normalenvektor vom letzten zum momentanen Punkt der Integration einen Vorzeichenwechsel erfährt, erfolgt auf der Detektorverbindungskurve eine Zeitumkehr. Falls die momentane Projektion verschwindet, werden die derzeitigen Koordinaten verwendet. Ansonsten werden vorhergehende und momentane Koordinaten mit den jeweiligen Projektionen gewichtet gemittelt bzw. die Nullstelle wird linear interpoliert. Die zugehörigen Koordinaten, Parameter und Vorzeichenwechsel werden in externen Variablen gespeichert und an geeigneter Stelle in der Hauptroutine (Abschnitt 1.6.2) u. a. zur Zeichnung verwendet. Schließlich werden die vorhergehenden Werte mit den momentanen überschrieben.

1.6.4 Bestimmung der einem Ort zugeordneten Zeit

Diese Funktion bestimmt die einem Ort (x, y) zugeordnete Zeit bezüglich einer Anfangslinee (Anfangsfläche) unter der Vorgabe eines approximativen Zeitpunkts. Wie im Fall der Trajektorien im Phasenraum, vgl. Abschnitt 2.11, wird zur numerischen Integration die CERN-Routine [39] verwendet. Die Integrationsgenauigkeit der Zeitintegration wird dabei auf 10^{-13} gesetzt. Bis auf den Fall der Wahrscheinlichkeitsdichte des zweidimensionalen gaußschen Wellenpakets, bei dem der Anfangsort analytisch bestimmbar ist, vgl. Abschnitt 1.4, erfolgt die zeitliche Rückwärtsintegration zunächst vom Vorgabezeitpunkt bis zum Anfangszeitpunkt. Dabei wird die anfängliche Schrittweite der numerischen Integration der jeweiligen Situation angepaßt, zum Minimum von einem Zehntel der auftretenden Zeitdifferenzen und 10^{-4} , aber nicht kleiner als die zehnfache Integrationsgenauigkeit von 10^{-12} . Zu einer groben Abschätzung der Zeitdifferenz

des so berechneten Anfangspunktes zur Anfangslinie wird die Projektion der Geschwindigkeit am Anfangsort auf die Liniennormale der Anfangslinie verwendet. Die Abschätzung der nächsten Zeitschrittdifferenz von $\Delta t = 2(\Delta \vec{r} \cdot \hat{\vec{n}}) / (\vec{v} \cdot \hat{\vec{n}})$ zur Gewinnung eines Anfangspunktes jenseits der Anfangslinie vom ersten Anfangspunkt aus betrachtet zum Zweck der Nullstellenfindung bezüglich der Koordinatendifferenz $\Delta \vec{r} \cdot \hat{\vec{n}}$ zur Anfangslinie bleibt deshalb grob, weil sich Δt auf die Anfangszeit bezieht und die dem Ort zugeordnete Zeit die Endzeit der Stromtrajektorie darstellt. Sollte die Koordinatendifferenz vom Betrag bereits kleiner als ein Zehntel der geforderten Ortsgenauigkeit von $\delta z = 10^{-13}$ sein, so wird dies bereits als Lösung des Problems angesehen.

Da die abgeschätzte Zeitdifferenz stark von der schließlich benötigten in grob unterschätzender Weise abweichen kann, wird für die weitergehende Suche nach einem Anfangspunkt jenseits der Anfangslinie ein Zeitdifferenzvervielfachungsfaktor verwendet, der in der Folge, auch abhängig von der zu Null initialisierten Anzahl $N_{\Delta t}$ der bereits durchgeführten Iterationen, mit einer restriktiven Extrapolation an die jeweils korrigiert zu erwartende Zeitdifferenz angepaßt wird, womit die Anzahl der nötigen Rückwärtsintegrationen deutlich verringert werden kann. In einer ähnlichen Weise wird der Möglichkeit Rechnung getragen, daß die abgeschätzte Zeitdifferenz deutlich größer als der wahre Wert sei kann, wonach die Zeitdifferenz einige Male um einen Faktor 10 reduziert werden kann. (Zum Vergleich mit den in der folgenden Schleife berechneten Werten wird das Vorzeichen der momentanen Koordinatendifferenz und der momentane Zeitpunkt verwendet.)

Die Schleife beginnt mit dem Vergleich von momentaner Koordinatendifferenz und vorhergehendem Vorzeichen (welches zum Vorzeichen der anfänglichen Koordinatendifferenz vordefiniert ist). Ist deren Produkt negativ, so wird der (neue) Testzeitwert um die (derzeitige) Zeitverschiebung verringert, ansonsten vergrößert. Danach erfolgt die numerische zeitliche Rückwärtsintegration mit dem Testzeitwert in obiger Weise zur Bestimmung der neuen Anfangskoordinaten mit zugehöriger Koordinatendifferenz zur Anfangslinie. Aufgrund des noch zu Null gesetzten Wertes einer Steuervariable wird zuerst auf die größenmäßige Überschätzung der Zeitdifferenz getestet: Falls das Produkt von momentaner und gespeicherter Koordinatendifferenz positiv sowie der Betrag der neuen Koordinatendifferenz größer als der Betrag der gespeicherten ist, wird das vorhergehende Vorzeichen geändert und der neue Zeitwert auf den vorhergehenden zurückgesetzt. Eine anfänglich auf 1 gesetzte Ganzzahl-Variable wird während des Schleifendurchlaufs jeweils in ihrem Vorzeichen geändert und im Falle eines positiven Wertes inkrementiert. Dabei wird die momentane Zeitverschiebung um einen Faktor 10 verkleinert, wobei auch Zeitverschiebungen gleichen Betrages in die andere Zeitrichtung mit abgedeckt werden. Dies wird (unter dem Rücksprung zum Schleifenbeginn) so lange versucht, bis die Variable den Wert 6 erreicht hat. An dieser Stelle wäre die anfängliche Zeitdifferenz auf einen Wert von 10^{-6} ihres Ausgangswertes reduziert. Führt die Suche nach einer Verringerung der Koor-

inatendifferenz oder einem Vorzeichenwechsel in der Koordinatendifferenz an dieser Stelle nicht zum Ziel, so wird die Iteration abgebrochen und die Suche nach einem Anfangspunkt auf der Anfangslinie bzw. die Suche nach einem Endzeitpunkt einer Stromtrajektorie eingestellt, welches auch eine Beendigung der Fortführung der Detektorverbindungskurve zur Folge hat.

An dieser Stelle wird die Variable $N_{\Delta t}$ der Zählung der Iterationen inkrementiert. Ist hier nun die momentane Koordinatendifferenz vom Betrag größer als die alte sowie gleichen Vorzeichens, so liegt ein Extremum vor. Mit den entsprechenden Vorzeichen wird eine Minimumsuche durchgeführt unter Verwendung der CERN-Bibliotheksfunktion [38] mit den Genauigkeiten von 10^{-10} für den Parameter ε und 10^{-9} für den Parameter δ des Toleranzintervalls. Wenn das gefundene Minimum größer als 0 ist, wird die Iteration ebenfalls mit den obigen Konsequenzen abgebrochen. Gleiches erfolgt, wenn das Minimum zwar negativ aber mit einem Betrag von kleiner 10^{-13} (der Integrationsgenauigkeit) nicht signifikant genug von der Anfangslinie entfernt ist. Im Fall eines negativen Minimums wird die Schleife verlassen, und die Fortsetzung erfolgt mit der Nullstellensuche, siehe unten.

Dieser Teil wird dann ausgeführt, wenn die momentane und die vorhergehende Koordinatendifferenz das gleiche Vorzeichen haben. Falls der momentane Punkt näher an der Anfangslinie liegt als der vorhergehende (Betrag der Koordinatendifferenz nimmt ab), wird, abhängig vom vorhergehenden Zeitdifferenzvervielfachungsfaktor, ein neuer vorläufiger Wert dessen gesetzt, unter Verwendung linearer Extrapolation auf die Anfangslinie. Ansonsten wird der Faktor auf 1 gesetzt. Um einen zu großen Sprung zu vermeiden, wird der Faktor auf die Größe $10 N_{\Delta t}^2$ beschränkt. Die momentane Zeitdifferenz wird auf die gespeicherte gesetzt unter Multiplikation mit dem Faktor. Danach werden die momentanen Werte auf die vorhergehenden kopiert, worauf der Sprung an den Anfang der Iteration folgt.

An diese Stelle des Programms gelangt man, wenn zwei Anfangspunkte auf verschiedenen Seiten der Anfangslinie zu verschiedenen Endzeiten der Rückwärtsintegration gefunden wurden. Mit diesen beiden Zeiten erfolgt eine Nullstellensuche mittels der CERN-Bibliotheksfunktion [41] mit einer Genauigkeit von 10^{-13} . Die in der Übergabefunktion durchgeführte Integration entspricht dabei genau der dieser Funktion.

1.7 Darstellung von Stromtrajektorien und Detektorverbindungskurven

In diesem Abschnitt betrachten wir die bereits in Abschnitt 1.6.1 erwähnten physikalischen Systeme, d. h. die zugehörigen Stromtrajektorien und Detektorverbindungskurven. Dabei wird zunächst das freie quantenmechanische gaußsche Wellenpaket in zwei Dimensionen erörtert, vgl. Abschnitt 1.4. Den zweiten Teil

bildet der in Abschnitt 1.5 beschriebene strahlende zeitveränderliche elektrische Dipol.

Für das gaußsche Wellenpaket betrachten wir die in Abschnitt 1.4 näher beschriebenen physikalischen Größen als mögliche detektierbare Größen. Diese sind die quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsdichte, die aus der Lagrange-Dichte der Schrödinger-Gleichung folgende Energiedichte ε_1 (Energiedichte 1) und die aus der Phasenraumverteilung resultierende „klassische“ Energiedichte ε_{cl} . Die zugehörigen momentanen wie auch zeitlich integrierten Stromdichten, aus denen die hier zu betrachtenden Kurven bestimmt werden, sind in den Bildern 1.1, 1.2 und 1.3 dargestellt.

Bild 1.6 zeigt Stromtrajektorien und Detektorverbindungskurven für die drei zuvor beschriebenen Größen. Die Anfangslinie wird durch die y -Achse gebildet, auf der jeweils acht Kurven im Abstand von $\Delta y = 0.4$ voneinander beginnen, wobei die erste Kurve im Zentrum des Wellenpakets im Koordinatenursprung beginnt. Die anfängliche Breite des sich in x -Richtung mit $v_x = 1$ bewegenden Pakets ist $\sigma_{x0} = 1$ mit $m = \hbar = 1$. Alle Anfangsbedingungen sind hier so gewählt, daß die in Abschnitt 1.6 beschriebenen Komplizierungen wie Kurven- und Zeitumkehr für diesen Fall nicht auftreten.

Die Kurven des Wahrscheinlichkeitsstroms werden im oberen Teil des Bildes 1.6 dargestellt. Das linke Bild zeigt die Stromtrajektorien des Wahrscheinlichkeitsstroms, also sogenannte Bohmsche Trajektorien, vgl. Abschnitt A.4. Zum Zeitpunkt $t = 0$ ist das Wellenpaket unkorreliert und besitzt seine minimale räumliche Ausdehnung. Die Spreizung der Trajektorien beschreibt gerade die Dispersion des Wellenpakets. Durch die zeitliche Entwicklung eines Gebietes entlang der Stromtrajektorien eines symmetrischen Gauß-Pakets wird das Gebiet einer Ähnlichkeitstransformation unterzogen, siehe Abschnitt 1.4 und [8]. Wie in Bild 1.1 zu erkennen, ist die integrierte Stromdichte um $t = 0$ herum außerhalb des zentralen Bereichs von der Kontraktion des Wellenpakets zu negativen Zeiten beeinflusst oder bestimmt. Das führt auch auf der y -Achse zu einem anfänglichen kontraktiven Verhalten – die Detektorverbindungskurven nähern sich zuerst der x -Achse, um zu späteren Zeiten ebenfalls zu divergieren.

Der mittlere Teil von Bild 1.6 besteht ebenfalls aus Stromtrajektorien im linken und Detektorverbindungskurven im rechten Bild. Die physikalische Größe ist hier die Energiedichte 1, ε_1 , deren momentane und zeitintegrierte Stromdichten in Bild 1.2 gezeigt sind. Die Energiegeschwindigkeit ist zentral höher und peripher niedriger als die Geschwindigkeit der Wahrscheinlichkeit, so daß die Trajektorien zentral weiter und am Rand weniger weit in x -Richtung führen als die oben dargestellten. (Weitere, nicht dargestellte Trajektorien mit größeren y -Werten laufen wegen der speziellen Form der Energiestromdichte $\vec{\pi}_{\varepsilon_1}$ anfänglich in negative x -Richtung.) Die integrierte Stromdichte zeigt im inneren Bereich vornehmlich in Richtung der Stromdichte selbst, so daß sich die inneren Stromtrajektorien von den Detektorverbindungskurven kaum unterscheiden. Der Einfluß der Kontrak-

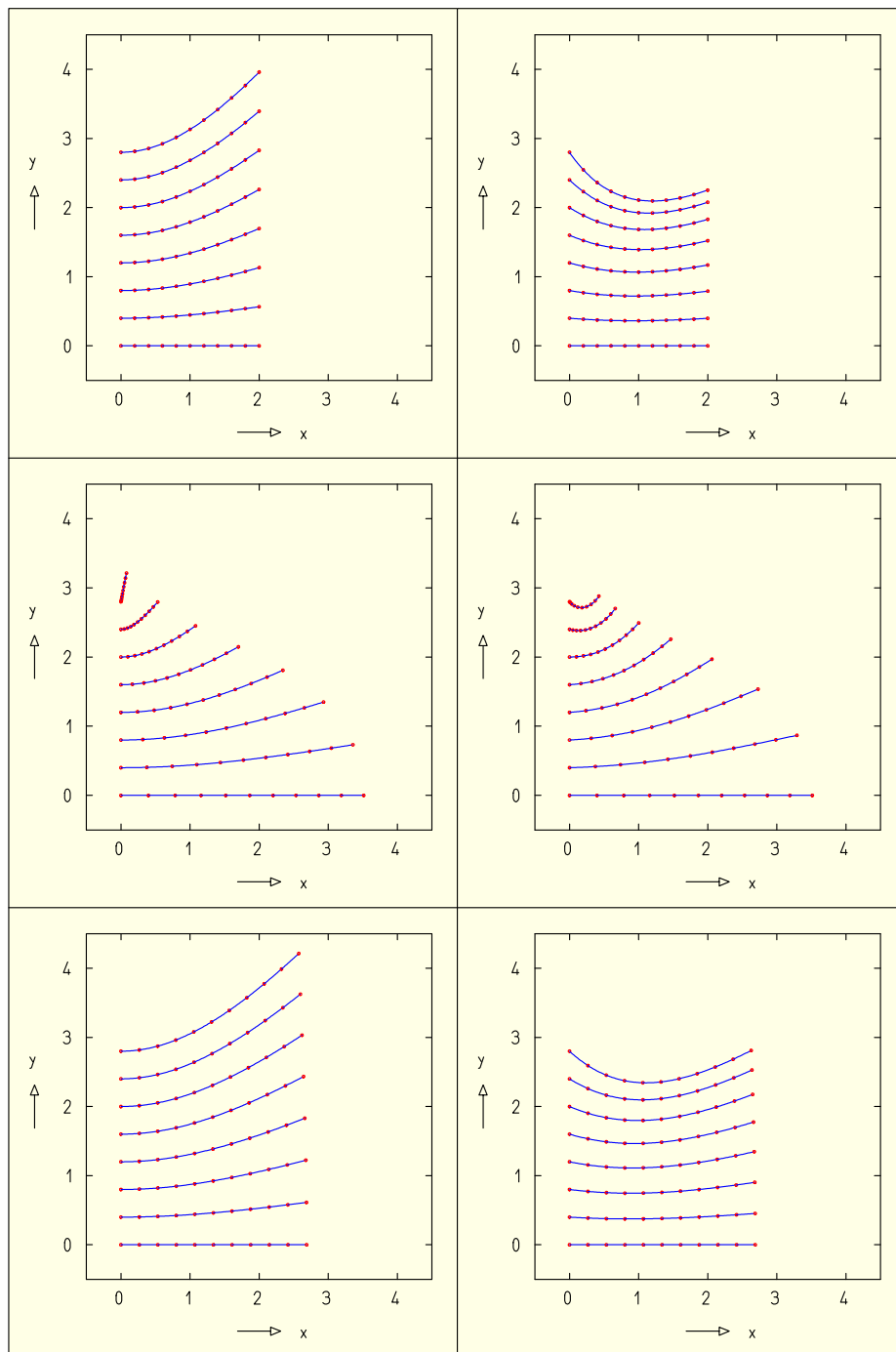


Abbildung 1.6: Linke Spalte: Stromtrajektorien mit Zeitmarken zu drei Dichten des freien quantenmechanischen gaußschen Wellenpakets in zwei Dimensionen. Rechte Spalte: Detektorverbindungskurven mit entsprechenden Zeitmarken den Bildern links entsprechend bei gleichen Anfangsbedingungen. Oben: Kurven für die Wahrscheinlichkeitsdichte. Mitte: Kurven für die Energiedichte 1. Unten: Kurven für die „klassische“ Energiedichte.

tion des anfänglichen Wellenpakets tritt erst weiter außen merklich hervor; die äußeren Kurven führen anfänglich zur x -Achse hin.

In den unteren Teilbildern von 1.6 sind wie für die anderen Größen links die Stromtrajektorien und rechts die Detektorverbindungskurven gezeigt, dieses Mal für die „klassische“ Energiedichte ε_{cl} , deren momentane und zeitintegrierte Stromdichten in Bild 1.3 dargestellt sind. Aufgrund der bereits beschriebenen Ähnlichkeiten der Stromdichte $\vec{\pi}_{\varepsilon_{cl}}$ zu der Wahrscheinlichkeitsstromdichte besitzen auch die zugehörigen Trajektorien und Detektorverbindungskurven gewisse Gemeinsamkeiten. Zwar ist die Energiegeschwindigkeit höher als die Geschwindigkeit der Stromdichte \vec{j} , die zeitlich transformierte Anfangskurve weicht für die gewählten Parameter aber nur wenig von der Form einer Geraden ab. Die Stromtrajektorien divergieren von Beginn an, und die Detektorverbindungskurven laufen anfänglich aufeinander zu, bevor sie ebenfalls divergieren.

An dieser Stelle untersuchen wir die Stromtrajektorien und Detektorverbindungskurven für einen strahlenden klassischen elektrischen Dipol, siehe Abschnitt 1.5. Wir beschränken uns dabei auf eine Situation innerhalb der gaußschen Zeitveränderlichkeit des Dipolmoments, die mit ihren Stromdichten bereits in Bild 1.4 dargestellt ist. Bild 1.7 zeigt diese Situation, bei der die Anfangsfläche bzw. Anfangsfläche innerhalb des ersten (eines kleineren) Pulses der Abstrahlung liegt. Senkrecht zur Dipolachse, d. h. um das Maximum der Abstrahlungsintensität im Fernfeld herum, erfolgt der Energietransport (im betrachteten Zeitintervall) nahezu mit c und radial nach außen. Je weiter man von dieser Ebene entfernt ist und sich somit näher an der Dipolachse befindet, um so mehr weicht die Flußrichtung der Energiedichte vom jeweiligen Radialstrahl ab. Wie bereits aus dem Geschwindigkeitsfeld in Bild 1.4 ersichtlich, bewegen sich die Stromtrajektorien bezüglich des Radialstrahls anfänglich auf die z -Achse zu. In deren Nähe verlangsamen die Trajektorien ihre Radialgeschwindigkeit so stark, daß sie durch die radiale (Quasi-)Nullstelle des Geschwindigkeitsfeldes laufen, um danach durch den Hauptpuls der Abstrahlung wieder beschleunigt zu werden. Dieses führt zu den beobachtbaren Knicken (Umkehrungen) in den Stromtrajektorien und zu der deutlich erkennbaren Ausstülpung in der transformierten Anfangsfläche. (Die Situation nahe der Dipolachse ist in Bild 1.8 vergrößert dargestellt.)

Beim Übergang zum Fernfeld, in dem die Bewegung letztlich radial nach außen mit der Geschwindigkeit c verläuft, wird die Ausstülpung gewissermaßen stationär: Der vom Ursprung aus überstrichene Winkelbereich bleibt konstant wie auch der radiale Abstand zwischen den einzelnen Linienteilen. Da sich die Anfangsfläche an der z -Achse nicht bewegt, kommt es in geringerer Entfernung zu dieser zu einer zweiten Ausstülpung aufgrund der zweiten radialen (Quasi-)Nullstelle des Geschwindigkeitsfeldes bei gaußscher Zeitabhängigkeit, siehe Bild 1.4. Allgemein treten bei n_0 (Quasi-)Nullstellen ebensoviele Ausstülpungen in der transformierten Anfangsfläche bzw. -fläche auf. Die finale Lage im Winkelbereich einer Ausstülpung hängt dabei von der Position der Anfangsfläche in bezug auf die Pulse der Abstrahlung ab.

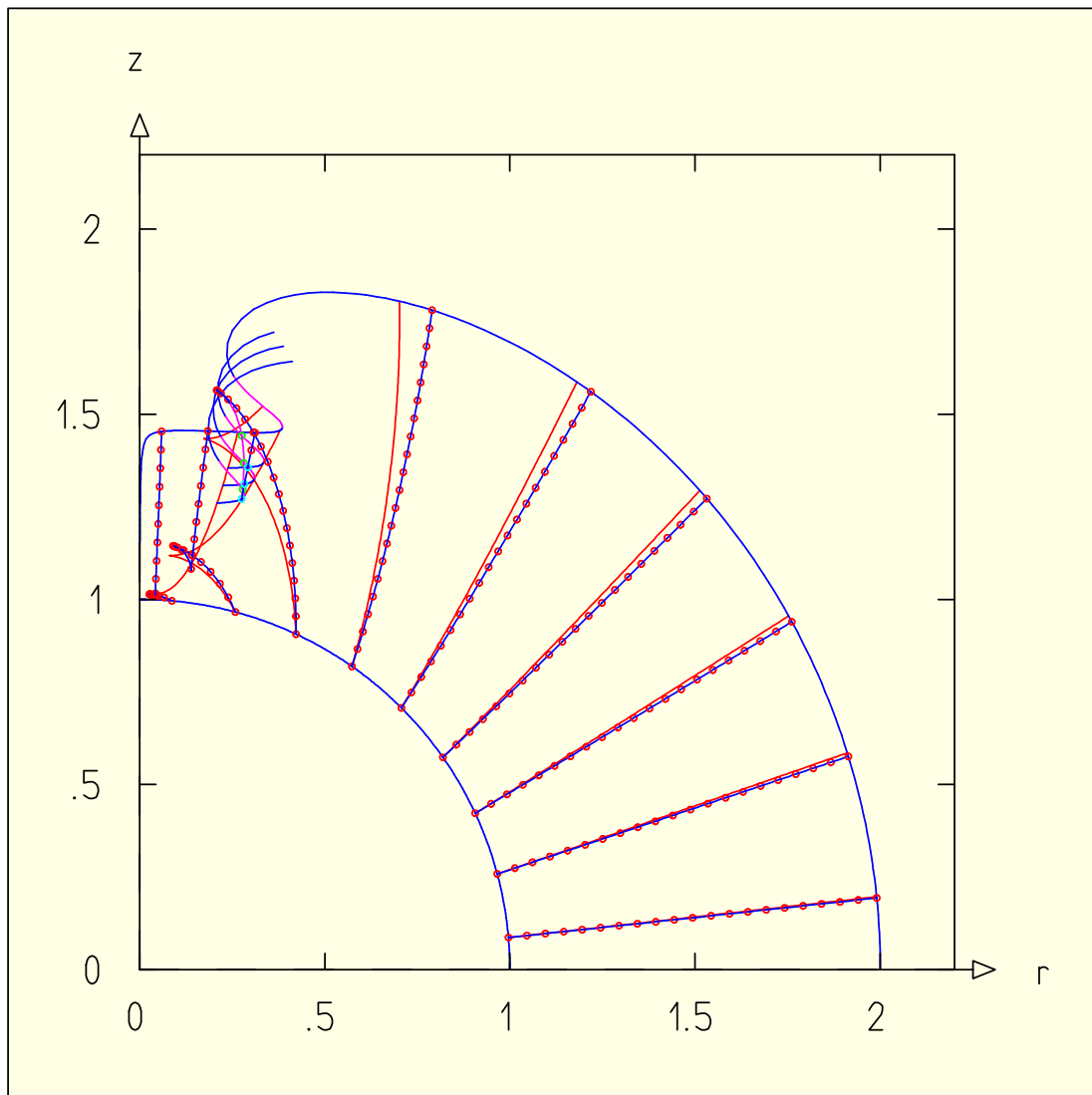


Abbildung 1.7: Transformation der Anfangsfläche in Form eines Viertelkreises unter den Stromtrajektorien eines strahlenden elektrischen Dipols mit der gaußschen Zeitabhängigkeit des Dipolmoments der Situation aus Bild 1.4. Gezeigt sind Stromtrajektorien (ohne Zeitmarken) und Detektorverbindungskurven (mit Zeitmarken). Der linke Teil der Abbildung ist in Bild 1.8 vergrößert dargestellt. (Die Farbkodierung wird im Text erläutert.)

Aufgrund der Mittelung durch Integration weichen die Detektorverbindungskurven bei größeren Winkeln von der z -Achse gemessen oder bei kleinen Zeiten nicht so sehr von der radialen Bewegung ab wie die Stromtrajektorien. Die Umkehrung der Trajektorien, die zur Ausstülpung der transformierten Anfangsfläche führt, verursacht eine lokale Umkehrbewegung dieser transformierten Anfangsfläche, was wiederum eine Umkehr der Detektorverbindungskurve zur Folge hat,

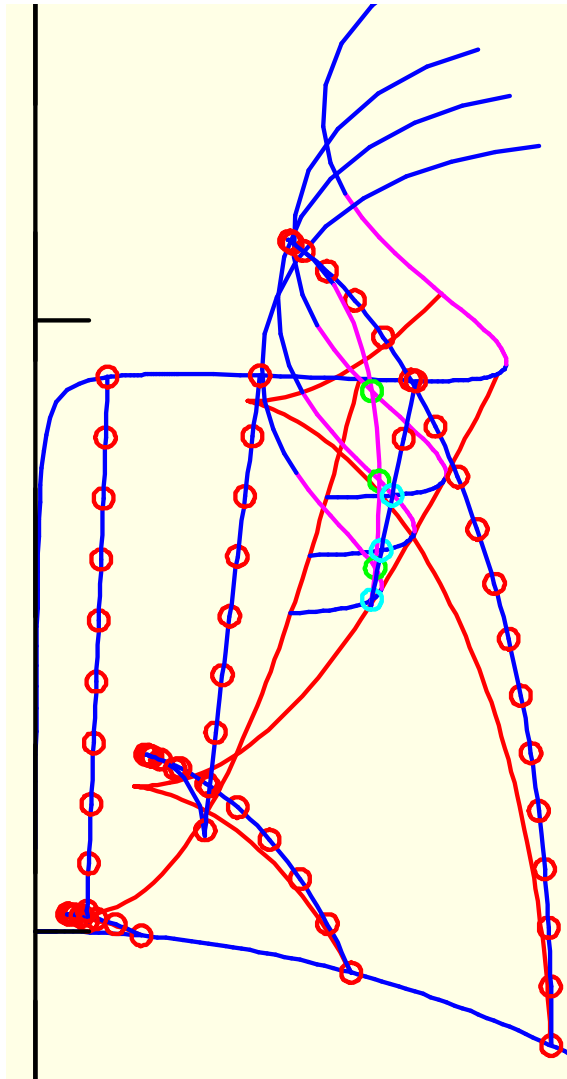


Abbildung 1.8: Vergrößerung des linken Teils aus Bild 1.7.

deren Auftreten ($\vec{j} \cdot \hat{n} = 0$ bzw. $\vec{v} \cdot \hat{n} = 0$) und Behandlung in den Abschnitten 1.6.1 und 1.6.2 eingehend beschrieben wird. Diese Linienumkehr tritt bei den beiden in Bild 1.7 bzw. Bild 1.8 gezeigten Detektorverbindungskurven nahe der z -Achse gleich doppelt auf. Die Kurven bewegen sich anfänglich auf die z -Achse zu, halten an und kehren um. Dabei bewegen sie sich in diesem Falle nach der ersten Umkehrung entgegengesetzt der Richtung \hat{I} und laufen in einem kleinen Bogen zurück in Richtung der Anfangslinie. Anschließend kehren die Kurven ein zweites Mal um, worauf sie wieder in Richtung von \hat{I} durchlaufen werden. In diesem Fall verlaufen die Kurven nach der zweiten Umkehr kaum noch gekrümmt.

Die dritte Detektorverbindungskurve von der z -Achse aus gesehen verläuft bezüglich ihres äußeren Aussehens ähnlich wie die beiden zuvor beschriebenen.

Allerdings kommt es zwischen den beiden Umkehrungen zu einer zeitlichen Rückwärtsentwicklung, weil die Projektion $\vec{l} \cdot \hat{n}$ ihr Vorzeichen ändert, vgl. Abschnitte 1.6.1 und 1.6.2. Diese Vorzeichenänderung hat ihre Ursache in der Ausstülpung der transformierten Anfangslinie. In den Bildern 1.7 und 1.8 ist das Vorzeichen der Projektion $\vec{l} \cdot \hat{n}$ durch ein Linienattribut gekennzeichnet ebenso wie die Detektorverbindungskurven in zeitlicher Rückwärtsentwicklung (magenta). Auch die Zeitmarken auf der Detektorverbindungskurve werden unterschieden, je nachdem, ob die Zeitentwicklung vorwärts (rot) oder rückwärts läuft (grün) oder bei wieder fortschreitender Zeitentwicklung der vorhergehende größte Zeitpunkt noch nicht wieder erreicht wurde (türkis). Schließlich enthalten die Bilder noch drei Ausschnitte transformierter Anfangslinien, mit denen die zuletzt betrachtete Detektorverbindungskurve an ihren Zeitmarken (vor dem bis dahin erreichten größten Zeitpunkt) gemeinsame Punkte besitzt.

1.8 Diskussion

In Abschnitt 1.3 wurde eine drei- bzw. mehrdimensionale Verallgemeinerung der Quantilbewegung in einer Dimension vorgestellt. Dabei treten nun zwei Kurvenscharen auf, die in einer Dimension in einer Kurve zusammenfallen. Diese Kurvenscharen bestehen einerseits aus den Stromtrajektorien des betrachteten Stromes und andererseits aus den hier so bezeichneten Detektorverbindungskurven, entlang derer die durch die Fläche des Flächenelements, welches in den Koordinaten dieser Fläche ausgedrückt ist, fließende Menge der betrachteten physikalischen Größe konstant bleibt. Dieses drückt sich in der Invarianz von $q(\underline{s})$ vom Kurvenparameter s aus, vgl. Abschnitt 1.3.8. Diese Invarianz gilt (bezüglich des Betrags) unabhängig von der (virtuellen) Laufrichtung der Zeit entlang der Detektorverbindungskurve.

Die in Abschnitt 1.7 betrachtete Dipolstrahlung beinhaltet eine Detektorverbindungskurve mit intermediärer zeitlicher Rückwärtsentwicklung, vgl. Bild 1.7 bzw. 1.8, dritte Kurve von der z -Achse gezählt. Am Endpunkt der Detektorverbindungskurve auf der transformierten Anfangsfläche hat $q(\underline{s})$ den gleichen Wert wie am Anfangspunkt. Während der zeitlichen Rückwärtsentwicklung ändert sich das Vorzeichen von $q(\underline{s})$, weil die Projektion $\vec{l} \cdot \hat{n}$ ihr Vorzeichen wechselt. Dies resultiert aus der Interpretation dieser Projektion als Linien- oder Flächendichte der als nichtnegativ betrachteten physikalischen Größe G . Betrachtet man die teilweise dargestellten transformierten Anfangsflächen zu früheren Zeiten, so werden diese von den Detektorverbindungskurven zuerst bei positiven Projektionen erreicht. Würde man die Gesamtheit der Endpunkte des ersten Erreichens aller Detektorverbindungskurven der transformierten Anfangsfläche betrachten, so würden einige Linienteile nicht erreicht. Erst die Weiterverfolgung eines Teils der Detektorverbindungskurven führt in diesem Fall jeweils zu einer intermediären zeitlichen Rückwärtsentwicklung mit anschließender Vorwärtsentwicklung, infolge

dieser die transformierte Anfangsline zwei weitere Male erreicht wird. Insgesamt treffen diese Detektorverbindungskurven die Linie dreimal, zweimal mit positiver und einmal mit negativer Projektion, womit effektiv der Wert $q(\underline{s})$ einmal übrig bleibt. Allgemein kann eine Linie eine ungerade Anzahl von Schnittpunkten mit einer Detektorverbindungskurve besitzen, von denen die mit positiver Projektion $\vec{I} \cdot \hat{n}$ im Wechsel einmal öfter auftreten als die mit negativer. Wenn auf einer transformierten Anfangsline Abschnitte mit negativer Projektion existieren, müssen, um diese Linie vollständig mit Detektorverbindungskurven zu erreichen, einige dieser (zuerst in die Zukunft und danach in die Vergangenheit) weiterverfolgt werden. In einer chronologischen Betrachtung erfolgt an einem Teil der Orte mit $\vec{I} \cdot \hat{n} = 0$ die Erzeugung von Flächenstücken mit positiver und negativer Projektion und an einem anderen Teil mit dieser Bedingung die Annihilation solcher Flächenstücke. Die gesamte Detektorverbindungskurve ergibt sich dann jeweils durch die Verbindung einzelner Kurvenstücke an diesen Orten.

Wie bereits in Abschnitt 1.6.1 erwähnt, stellt eine negative Projektion $\vec{I} \cdot \hat{n}$ eine im Detektor befindliche Quelle dar. Eine Beschreibung mit einer Projektion eines Vorzeichens läßt sich allgemein nur durch die explizite Hinzunahme des Detektors mit Wechselwirkung in das physikalische System erreichen. In dieser Beschreibung sollte der Detektor als dissipatives System ankoppeln.

Die vollständige Konstruktion der auf mehrere Dimensionen verallgemeinerten Quantilbewegung besteht also aus zwei Kurvenscharen, wobei die erste aus den Stromtrajektorien des zur Größe G gehörenden Feldes besteht. Diese Trajektorien beschreiben den kausalen Transport zwischen den verschiedenen Raumbereichen bzw. Detektoreintrittsflächen. Die zweite Schar besteht aus den Detektorverbindungskurven, die die Segmentierung der Detektoreintrittsflächen, ausgehend von der ursprünglichen Wahl auf der Fläche S_1 , auf die transportierte bzw. transformierte Fläche S_2 zu einer späteren Zeit überträgt. Eine solche Übertragung entlang von Verbindungskurven braucht nicht in einer kausalen Weise zu erfolgen.

Kapitel 2

Transport im Phasenraum

2.1 Klassischer Phasenraum und Liouville-Theorem

Der Phasenraum eines klassischen Systems wird aufgespannt von den Koordinaten des Systems und den zugehörigen kanonisch konjugierten Variablen, den (verallgemeinerten) Impulsen [21]. (Wir verwenden den Begriff Koordinaten auch für beide Variablen.) In ihm lassen sich die Bewegungszustände des Systems beschreiben, denn jeder Zustand ist durch einen Punkt des Phasenraums festgelegt. Die Zeitentwicklung ergibt sich mit den Bewegungsgleichungen eindeutig aus der Vorgabe der Anfangsbedingungen, wobei der Phasenraumpunkt eines Zustandes eine Bahnkurve (Trajektorie) im Phasenraum beschreibt. Ist der Zustand eines Systems (zu einem bestimmten Zeitpunkt) nicht festgelegt bzw. bekannt oder wird eine Gesamtheit verschiedener Systeme (Ensemble) betrachtet, so läßt sich im Phasenraum eine Wahrscheinlichkeitsdichte angeben bzw. definieren, welche die Verteilung der Zustände beschreibt. Aus der Anfangsverteilung folgt unter der Zeitentwicklung jedes Punktes die Phasenraumverteilung zu einem späteren Zeitpunkt, wobei die Wahrscheinlichkeitsdichte i. a. mit der Jacobi-Determinante der alten zu den neuen Koordinaten zu multiplizieren ist.

Im Falle konservativer Systeme mit N_F Freiheitsgraden ergeben sich die Bewegungsgleichungen der Koordinaten q_k und der Impulse p_k aus einer Hamilton-Funktion $H(q, p, t)$, $q = (q_1, \dots, q_{N_F})$, $p = (p_1, \dots, p_{N_F})$:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial}{\partial p_i} H(q, p, t) \quad , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial}{\partial q_i} H(q, p, t) \quad , \quad i = 1, \dots, N_F \quad .$$

Aufgrund des Vorzeichenunterschiedes in Ort und Impuls besitzen die Gleichungen eine symplektische Struktur. In einfachen Fällen ist $H(q, p, t)$ die Summe der kinetischen und potentiellen Energien, $H(q, p, t) = T(p) + V(q)$, in denen die kinetische Energie T nur von den Impulsen und die potentielle Energie V nur von den Koordinaten abhängt und eine explizite Zeitabhängigkeit nicht auftritt.

Wir betrachten ein konservatives System mit einem Freiheitsgrad, welches durch die Hamilton-Funktion $H(x, p, t)$ beschrieben werde. Die Bewegungsgleichungen in einer Umgebung eines Punktes (x, p) lassen sich (für geeignete Hamilton-Funktionen) approximieren ($\mu, \nu \in \{0, 1\}$),

$$\begin{aligned}\dot{x}(x + \mu \Delta x, p + \nu \Delta p, t) &= \frac{\partial H}{\partial p}(x + \mu \Delta x, p + \nu \Delta p, t) = \\ &= \frac{\partial H}{\partial p}(x, p, t) + \mu \Delta x \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p}(x, p, t) + \nu \Delta p \frac{\partial^2 H}{\partial p^2}(x, p, t) + \dots \quad , \\ \dot{p}(x + \mu \Delta x, p + \nu \Delta p, t) &= -\frac{\partial H}{\partial x}(x + \mu \Delta x, p + \nu \Delta p, t) = \\ &= -\frac{\partial H}{\partial x}(x, p, t) - \mu \Delta x \frac{\partial^2 H}{\partial x^2}(x, p, t) - \nu \Delta p \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p}(x, p, t) + \dots \quad .\end{aligned}$$

Daraus ergeben sich die Zeitableitungen von Koordinatendifferenzen zu

$$\begin{aligned}\dot{x}(x + \Delta x, p, t) - \dot{x}(x, p, t) &= \Delta x \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p}(x, p, t) + \dots \quad , \\ \dot{x}(x, p + \Delta p, t) - \dot{x}(x, p, t) &= \Delta p \frac{\partial^2 H}{\partial p^2}(x, p, t) + \dots \quad , \\ \dot{p}(x + \Delta x, p, t) - \dot{p}(x, p, t) &= -\Delta x \frac{\partial^2 H}{\partial x^2}(x, p, t) + \dots \quad , \\ \dot{p}(x, p + \Delta p, t) - \dot{p}(x, p, t) &= -\Delta p \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p}(x, p, t) + \dots \quad .\end{aligned}$$

Die Koordinatendifferenzen nach einem Zeitschritt Δt bei Verschiebungen in x und p lauten dann

$$\begin{aligned}\Delta x_1(t + \Delta t) &= \Delta x + \Delta x \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p} \Delta t \quad , \quad \Delta x_2(t + \Delta t) = \Delta p \frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \Delta t \quad , \\ \Delta p_1(t + \Delta t) &= -\Delta x \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} \Delta t \quad , \quad \Delta p_2(t + \Delta t) = \Delta p - \Delta p \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p} \Delta t \quad .\end{aligned}$$

Die Phasenraumfläche ergibt sich aus der Determinante der Verschiebungen und ist proportional zur (inversen) Jacobi-Determinante,

$$\begin{aligned}\Delta A &= \begin{vmatrix} \Delta x_1(t + \Delta t) & \Delta x_2(t + \Delta t) \\ \Delta p_1(t + \Delta t) & \Delta p_2(t + \Delta t) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \Delta x \left(1 + \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p} \Delta t\right) & \Delta p \frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \Delta t \\ -\Delta x \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} \Delta t & \Delta p \left(1 - \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p} \Delta t\right) \end{vmatrix} \\ &= \Delta x \Delta p \left(1 + \left[\frac{\partial^2 H}{\partial x^2} \frac{\partial^2 H}{\partial p^2} - \left(\frac{\partial^2 H}{\partial x \partial p}\right)^2\right] (\Delta t)^2\right) = \Delta x \Delta p (1 + \mathcal{O}((\Delta t)^2)) \quad ,\end{aligned}$$

womit sich die Fläche sich wegen des Verschwindens der 1. Ordnung in Δt nicht ändert,

$$\Delta A(t + \Delta t) - \Delta A(t) = \mathcal{O}((\Delta t)^2) \quad , \quad \frac{d}{dt} \Delta A(t) = 0 \quad .$$

Diese Aussage, allgemein für beliebige Freiheitsgrade formuliert, ist das Liouville-Theorem. Da damit die Jacobi-Determinante 1 ist, bleiben die Werte der Wahrscheinlichkeitsdichten bei der Zeitentwicklung (entlang der Trajektorien) erhalten. Die Flächenerhaltung gilt auch noch mit allgemeineren Hamilton-Funktionen, z. B. für solche, die in p unstetig bzw. stückweise glatt sind und u. a. zu Impulssprüngen, insbesondere zur Impulsumkehr führen, wodurch die Trajektorien ebenfalls unstetig werden.

2.2 Hamilton-Funktion und Phasenraumverteilung

Die aus einer Hamilton-Funktion folgenden Bewegungsgleichungen determinieren Trajektorien im Phasenraum, mit denen die Zeitentwicklung einer Phasenraumverteilung festgelegt ist. Die umgekehrte Frage ist, unter welchen Umständen man aus einem vorgegebenen zeitlichen Verhalten einer Verteilung Bewegungsgleichungen und ggf. eine Hamilton-Funktion bestimmen kann und wie eindeutig eventuelle Lösungen dafür sind. Eine Verteilung, deren Zeitverhalten (ohne Jacobi-Determinante) aus Trajektorien einer Bewegungsgleichung resultiert, genügt der Gleichung

$$-\frac{\partial W(x, p, t)}{\partial t} = \frac{dx}{dt} \frac{\partial W(x, p, t)}{\partial x} + \frac{dp}{dt} \frac{\partial W(x, p, t)}{\partial p}$$

wegen der Invarianz der Funktionswerte entlang der Trajektorien. Sollen die Zeitableitungen der Koordinaten aus einer Hamilton-Funktion h folgen, so gilt

$$-\frac{\partial W(x, p, t)}{\partial t} = \frac{\partial h(x, p, t)}{\partial p} \frac{\partial W(x, p, t)}{\partial x} - \frac{\partial h(x, p, t)}{\partial x} \frac{\partial W(x, p, t)}{\partial p} \quad . \quad (2.1)$$

Diese Gleichung ist die Bestimmungsgleichung für $h(x, p, t)$. Als lineare inhomogene partielle Differentialgleichung 1. Ordnung, wobei der Term $-\partial W/\partial t$ die Inhomogenität darstellt, läßt sie sich mit Standardmethoden [13] lösen.

Andererseits kann man versuchen, eine Green-Funktion bzw. Fundamentallösung G der Gleichung zu finden, indem man die Inhomogenität zu einer zweidimensionalen Delta-Distribution setzt,

$$\frac{\partial G}{\partial p} \frac{\partial W}{\partial x} - \frac{\partial G}{\partial x} \frac{\partial W}{\partial p} = \delta(x - x') \delta(p - p') \quad .$$

(Für die folgenden Schritte unterdrücken wir die explizite Zeitabhängigkeit in der Darstellung.) Mit einer allgemeinen Inhomogenität $\nu(x, p)$ ist eine Lösung $n(x, p)$ dann gegeben durch (Bedeutung von ungestrichenen und gestrichenen Variablen vertauscht)

$$n(x, p) = \int dx' \int dp' G(x', x, p', p) \nu(x', p') \quad .$$

Als Ansatz verwenden wir

$$G(x, x', p, p') = \delta(f_1(x, x', p, p')) \Theta(f_2(x, x', p, p')) \quad ,$$

wobei $\Theta(\cdot)$ die Sprungfunktion darstellt. Es gilt

$$\frac{\partial G}{\partial x} = \frac{\partial f_1}{\partial x} \delta'(f_1) \Theta(f_2) + \frac{\partial f_2}{\partial x} \delta(f_1) \delta(f_2) \quad , \quad \frac{\partial G}{\partial p} = \frac{\partial f_1}{\partial p} \delta'(f_1) \Theta(f_2) + \frac{\partial f_2}{\partial p} \delta(f_1) \delta(f_2) \quad ,$$

womit

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial p} \frac{\partial W}{\partial x} - \frac{\partial f_1}{\partial x} \frac{\partial W}{\partial p}\right) \delta'(f_1) \Theta(f_2) + \left(\frac{\partial f_2}{\partial p} \frac{\partial W}{\partial x} - \frac{\partial f_2}{\partial x} \frac{\partial W}{\partial p}\right) \delta(f_1) \delta(f_2) = \delta(x - x') \delta(p - p')$$

folgt. Der erste Klammerausdruck muß identisch verschwinden. Daher ist f_1 eine Funktion von W ; wir setzen $f_1 = \tilde{f}_1(W(x, p) - W(x', p'))$. Mit $\partial \tilde{f}_1 / \partial x = \tilde{f}'_1 \partial W / \partial x$ und $\partial \tilde{f}_1 / \partial p = \tilde{f}'_1 \partial W / \partial p$ folgt für das Produkt der Delta-Distributionen des zweiten Summanden die Determinante D der Transformation zu den Koordinaten x, p ,

$$D^{-1} = \begin{vmatrix} \tilde{f}'_1 \frac{\partial W}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial x} \\ \tilde{f}'_1 \frac{\partial W}{\partial p} & \frac{\partial f_2}{\partial p} \end{vmatrix} = \tilde{f}'_1 \left(\frac{\partial f_2}{\partial p} \frac{\partial W}{\partial x} - \frac{\partial f_2}{\partial x} \frac{\partial W}{\partial p} \right) .$$

Mit dem Vorfaktor und dem Vergleich mit der Inhomogenität folgt $\tilde{f}'_1 = 1$. Dieses führt zusammen mit der Ersetzung $f_2 = \tilde{f}_2(x, p) - \tilde{f}_2(x', p')$ zu

$$G(x, x', p, p') = \delta(W(x, p) - W(x', p')) \Theta(\tilde{f}_2(x, p) - \tilde{f}_2(x', p')) .$$

Die Integration erfolgt also entlang der Höhenlinien von W , und die Funktion $\tilde{f}_2(x, p)$ im Argument der Sprungfunktion kann als Koordinate entlang einer Höhenlinie verstanden werden. Zusätzlich kann der Kern G außerhalb einer Umgebung um die zu (x', p') gehörende Höhenlinie mittels einer charakteristischen Funktion abgeschnitten werden, um nicht andere Linien mit gleichem W in die Integration mit einzubeziehen. Sei $p'_{i,x,p}(x')$ eine abschnittsweise Lösung der Höhenlinien-Gleichung $W(x', p') = W(x, p)$, deren Randpunkte übereinstimmen, $p'_{i,x,p}(x'_{i,\max}) = p'_{i+1,x,p}(x'_{i+1,\min})$, und die den Punkt (x, p) enthalten, der als Randpunkt des letzten Summanden definiert sei, so läßt sich die Lösung schreiben als

$$n(x, p) = \sum_i \sigma_i \int_{x'_{i,\min}}^{x'_{i,\max}} dx' \frac{\nu(x', p'_{i,x,p}(x'))}{\left. \frac{\partial W}{\partial p'} \right|_{x', p'_{i,x,p}(x')}} .$$

Eine entsprechende Darstellung $x'_{i,x,p}(p')$ führt auf

$$n(x, p) = - \sum_i \sigma_i \int_{p'_{i,\min}}^{p'_{i,\max}} dp' \frac{\nu(x'_{i,x,p}(p'), p')}{\left. \frac{\partial W}{\partial x'} \right|_{x'_{i,x,p}(p'), p'}} .$$

Die Vorzeichen σ_i sind dabei positiv (negativ) zu wählen, wenn eine geschlossene Kurve auf einem Teilstück in mathematisch positiver (negativer) Richtung durchlaufen wird.

Eine partikuläre Lösung der ursprünglichen, zeitabhängigen Gleichung (2.1) kann damit in der Form

$$\begin{aligned} h_p(x, p, t) &= \\ &= \sum_i \sigma_i \int_{x'_{i,\min}}^{x'_{i,\max}} dx' \frac{\left. \frac{\partial W}{\partial t} \right|_{x', p'_{i,x,p,t}(x'), t}}{\left. \frac{\partial W}{\partial p'} \right|_{x', p'_{i,x,p,t}(x'), t}} = - \sum_i \sigma_i \int_{p'_{i,\min}}^{p'_{i,\max}} dp' \frac{\left. \frac{\partial W}{\partial t} \right|_{x'_{i,x,p,t}(p'), p', t}}{\left. \frac{\partial W}{\partial x'} \right|_{x'_{i,x,p,t}(p'), p', t}} \end{aligned} \quad (2.2)$$

geschrieben werden. Die allgemeine Lösung ergibt sich durch Addition der allgemeinen Lösung der homogenen Gleichung,

$$h(x, p, t) = h_p(x, p, t) + g(t, W(x, p, t)) \quad . \quad (2.3)$$

Im allgemeinen hängt eine so gefundene Hamilton-Funktion $h(x, p, t)$ von der expliziten Form der Verteilung W ab. Eine zugrundeliegende allgemeine Dynamik kann nur existieren, falls die expliziten Abhängigkeiten von W durch eine geeignete Wahl von $g(t, W(x, p, t))$ eliminiert werden können. Darüber hinaus ist sinnvollerweise zu verlangen, daß $h(x, p, t)$ eine „eindeutige“ Funktion ihrer Variablen ist.

2.3 Ströme und Kontinuitätsgleichung im Phasenraum

Wir betrachten nun zunächst den Fall allgemeiner klassischer Bewegungsgleichungen, die sich nicht notwendigerweise aus einer Hamilton-Funktion ergeben,

$$\dot{x} = \dot{x}(x, p, t) \quad , \quad \dot{p} = \dot{p}(x, p, t) \quad .$$

Für eine daraus folgende klassische Bewegung $x = x(x_i, p_i, t)$, $p = p(x_i, p_i, t)$ wird die Phasenraumverteilung durch $W(x, p, t) = W(x_i, p_i, 0)$ konstruiert, d. h. $dW/dt = 0$. Mit der Jacobi-Determinante $D(x, p, t) = \partial(x_i, p_i)/\partial(x, p)$ erhält man

$$W_n(x, p, t) = W(x, p, t)D(x, p, t) \quad (2.4)$$

als Verteilung mit zeitlich konstanter Norm. Mit der Definition der (Wahrscheinlichkeits-)Ströme

$$J_x(x, p, t) = \dot{x}(x, p, t)W_n(x, p, t) \quad , \quad J_p(x, p, t) = \dot{p}(x, p, t)W_n(x, p, t) \quad (2.5)$$

in x - und p -Richtung kann die Bewegung ebenfalls beschrieben werden. Die zeitliche Änderung der Verteilung ist – wie man direkt verifiziert – über eine Kontinuitätsgleichung mit den Koordinatenableitungen (dimensionsabhängige Divergenz) der Ströme verknüpft,

$$-\frac{\partial W_n(x, p, t)}{\partial t} = \frac{\partial J_x(x, p, t)}{\partial x} + \frac{\partial J_p(x, p, t)}{\partial p} \quad . \quad (2.6)$$

Eine solche Beziehung gilt für normierte Verteilungen $W_n(x, p, t)$ entsprechend den erhaltenen Größen aus Kapitel 1 auch ohne Beziehung (2.4) und den Bezug zur Klassik.

Die oben erwähnte Verifikation von (2.6) für klassische Verteilungen der Form (2.4) beinhaltet die Berechnung der totalen Zeitableitung der Jacobi-Determinante $D(x, p, t)$ oder ihrer Inversen $D^{-1}(x, p, t)$, die sich zu

$$\frac{dD^{-1}(x, p, t)}{dt} = D^{-1}(x, p, t) \left(\frac{\partial \dot{x}}{\partial x} + \frac{\partial \dot{p}}{\partial p} \right)$$

ergibt. Dabei wurden die Ableitungen der Geschwindigkeiten nach den Anfangskordinaten auf die nach den momentanen Koordinaten zurückgeführt. Das Liouville-Theorem, vgl. Abschnitt 2.1, welches $D(x, p, t) = 1$ beinhaltet, ist damit gleichbedeutend mit dem Verschwinden der Divergenz der Phasenraumgeschwindigkeit, und die Bewegung entspricht der einer inkompressiblen Flüssigkeit.

Die Umkehrung des Problems besteht in der Bestimmung der Ströme J_x und J_p aus einer vorgegebenen Verteilung W_n über die Divergenz. Dabei besteht insbesondere die Eichfreiheit

$$J_x \rightarrow J_x - \frac{\partial K}{\partial p} \quad , \quad J_p \rightarrow J_p + \frac{\partial K}{\partial x} \quad , \quad (2.7)$$

mit einer frei wählbaren Funktion K . Eine mögliche Einschränkung der Wahlfreiheit besteht darin, das asymptotische Verhalten der Ströme (in x und p) dem der Verteilung anzupassen. Kann die Gültigkeit des 2. Newtonschen Gesetzes in der Form für x (über die Bewegungsgleichung $\dot{x} = p/m$) angenommen werden, so kann

$$J_x(x, p, t) = \frac{p}{m} W_n(x, p, t) \quad (2.8)$$

verwendet werden. Aus den Strömen und der Verteilung ergeben sich umgekehrt die Zeitableitungen (Geschwindigkeiten) der Koordinaten,

$$v_x(x, p, t) = \dot{x}(x, p, t) = \frac{J_x(x, p, t)}{W_n(x, p, t)} \quad , \quad v_p(x, p, t) = \dot{p}(x, p, t) = \frac{J_p(x, p, t)}{W_n(x, p, t)} \quad . \quad (2.9)$$

Aus diesen gekoppelten Differentialgleichungen 1. Ordnung können – wie bei direkt gegebenen Bewegungsgleichungen – Trajektorien bzw. Flußlinien berechnet werden. Im Falle eines Hamiltonschen Systems führt diese Betrachtungsweise (bei entsprechender Wahl der Ströme) auf dieselben Bewegungsgleichungen. Mit der oben erwähnten asymptotischen Anpassung der Ströme an die Verteilung werden „unphysikalisch“ hohe Geschwindigkeiten im Außenbereich vermieden.

2.4 Beispiele vorgegebener klassischer Verteilungen

Als erstes betrachten wir eine korrelationsfreie, zentral positionierte (unnormierte und normierte) Gauß-Verteilung

$$W(x, p, t) = \frac{1}{2\pi A} \exp \left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2(t)} - \frac{p^2}{2\sigma_p^2(t)} \right) \quad , \quad A = \begin{cases} \sigma_x(0)\sigma_p(0) & : \delta = 0 \\ \sigma_x(t)\sigma_p(t) & : \delta = 1 \end{cases} \quad .$$

Unnormierte und normierte Verteilung werden dabei durch $\delta = 0$ und $\delta = 1$ charakterisiert. Die nach (2.3) konstruierte Hamilton-Funktion schreibt sich für diesen Fall als

$$h(x, p, t) = \int_{x_{\min}}^x dx' \left[\frac{\partial W}{\partial t} \Big/ \frac{\partial W}{\partial p} \right]_{x', p'(x'), t} + g(t, W(x, p, t)) \quad (2.10)$$

mit der aus $W(x', p', t) = W(x, p, t)$ folgenden Parametrisierung $p'(x')$ der Höhenlinie

$$p' = \text{sign}(p) \frac{\sigma_p(t)}{\sigma_x(t)} \sqrt{x^2 + \frac{\sigma_x^2(t)}{\sigma_p^2(t)} p^2 - x'^2} \quad , \quad x_{\min} = -\sqrt{x^2 + \frac{\sigma_x^2(t)}{\sigma_p^2(t)} p^2} \quad .$$

Das Resultat für die Hamilton-Funktion lautet

$$\begin{aligned} h(x, p, t) = & \left(\delta - \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2(t)} + \frac{p^2}{\sigma_p^2(t)} \right) \right) \frac{d}{dt} (\sigma_x(t) \sigma_p(t)) \arctan \left(\frac{x \sigma_p(t)}{p \sigma_x(t)} \right) \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{\dot{\sigma}_x(t)}{\sigma_x(t)} - \frac{\dot{\sigma}_p(t)}{\sigma_p(t)} \right) xp + g_1(t, W(x, p, t)) \quad . \end{aligned}$$

Mit der Festlegung $g_1 = 0$ folgen die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{x} = \frac{\partial h}{\partial p} = & -\delta \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2(t)} + \frac{p^2}{\sigma_p^2(t)} \right)^{-1} \frac{x}{\sigma_x(t) \sigma_p(t)} \frac{d}{dt} (\sigma_x(t) \sigma_p(t)) \\ & - \frac{p}{\sigma_p^2(t)} \arctan \left(\frac{x \sigma_p(t)}{p \sigma_x(t)} \right) \frac{d}{dt} (\sigma_x(t) \sigma_p(t)) + \frac{\dot{\sigma}_x(t)}{\sigma_x(t)} x \quad , \\ \dot{p} = -\frac{\partial h}{\partial x} = & -\delta \left(\frac{x^2}{\sigma_x^2(t)} + \frac{p^2}{\sigma_p^2(t)} \right)^{-1} \frac{p}{\sigma_x(t) \sigma_p(t)} \frac{d}{dt} (\sigma_x(t) \sigma_p(t)) \\ & + \frac{x}{\sigma_p^2(t)} \arctan \left(\frac{x \sigma_p(t)}{p \sigma_x(t)} \right) \frac{d}{dt} (\sigma_x(t) \sigma_p(t)) + \frac{\dot{\sigma}_p(t)}{\sigma_p(t)} p \quad . \end{aligned}$$

Durch Entkopplung und Integration folgen daraus die Trajektorien

$$\begin{aligned} x(t) = & \sigma_x(t) \sqrt{C_0 + 2\delta \ln \left(\frac{\sigma_x(0) \sigma_p(0)}{\sigma_x(t) \sigma_p(t)} \right)} \sin \left(C_1 \frac{\sigma_x(0) \sigma_p(0)}{\sigma_x(t) \sigma_p(t)} \right) \quad , \\ p(t) = & \sigma_p(t) \sqrt{C_0 + 2\delta \ln \left(\frac{\sigma_x(0) \sigma_p(0)}{\sigma_x(t) \sigma_p(t)} \right)} \cos \left(C_1 \frac{\sigma_x(0) \sigma_p(0)}{\sigma_x(t) \sigma_p(t)} \right) \end{aligned}$$

mit den aus den Anfangsbedingungen bestimmten Integrationskonstanten

$$C_0 = \frac{x_0^2}{\sigma_x^2(0)} + \frac{p_0^2}{\sigma_p^2(0)} \quad , \quad C_1 = \arctan \left(\frac{x_0 \sigma_p(0)}{p_0 \sigma_x(0)} \right) \quad .$$

Ist das Produkt der Orts- und Impulsbreiten konstant, so bewegen sich x und p (in der Eichung $g_1 = 0$) wie die Breiten. Verringert sich das Produkt, so wird der von der Gesamtheit der Trajektorien überstrichene Bereich z. T. doppelt oder mehrfach überdeckt. Beim normierten Fall ($\delta = 1$) verlassen die Trajektorien einen Bereich um den Ursprung. Wächst das Produkt hingegen, so wird ein Teil des Raums (Winkelbereich) nicht mehr von Trajektorien durchlaufen. Im normierten Fall wird der Radikand für nahe am Ursprung startende Trajektorien negativ, so daß diese im Ursprung enden bzw. dort verschwinden.

Für die normierte Verteilung ($\delta = 1$) genügt der Ansatz

$$J_x(x, p, t) = -\sigma_x(t)\dot{\sigma}_x(t)\frac{\partial}{\partial x}W(x, p, t) \quad , \quad J_p(x, p, t) = -\sigma_p(t)\dot{\sigma}_p(t)\frac{\partial}{\partial p}W(x, p, t)$$

in der hydrodynamischen Formulierung mit Strömen der Kontinuitätsgleichung (2.6). Die Geschwindigkeiten ergeben sich daraus zu

$$\dot{x} = v_x = \frac{J_x}{W} = \frac{\dot{\sigma}_x(t)}{\sigma_x(t)}x \quad , \quad \dot{p} = v_p = \frac{J_p}{W} = \frac{\dot{\sigma}_p(t)}{\sigma_p(t)}p \quad ,$$

welche zu den Trajektorien

$$x(t) = \frac{\sigma_x(t)}{\sigma_x(0)}x(0) \quad , \quad p(t) = \frac{\sigma_p(t)}{\sigma_p(0)}p(0)$$

führen. Setzt man $J_x = pW/m$, so erhält man nach (2.6) im allgemeinen Fall einen Strom J_p , der Terme mit einer p -Abhängigkeit $\sim \dot{\sigma}_x(t) \operatorname{erf}(p/(\sqrt{2}\sigma_p(t)))$ enthält. Damit die Ströme im Unendlichen verschwinden, ist $\sigma_x(t) = \sigma_x(0) = \sigma_x$ zu wählen. In dieser Spezialisierung gilt für die Ströme und Geschwindigkeiten

$$J_x = v_x W = \frac{p}{m}W \quad , \quad J_p = v_p W = \left(\frac{\dot{\sigma}_p(t)}{\sigma_p(t)}p - \frac{\sigma_p^2(t)}{m\sigma_x^2}x \right) W \quad .$$

Die Lösung der Differentialgleichungen für die Trajektorien lautet

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0) \cos \phi(t) + \frac{p(0)\sigma_x}{\sigma_p(0)} \sin \phi(t) \quad , \\ p(t) &= -\frac{x(0)\sigma_p(t)}{\sigma_x} \sin \phi(t) + \frac{p(0)\sigma_p(t)}{\sigma_p(0)} \cos \phi(t) \quad , \\ \phi(t) &= \frac{1}{m\sigma_x} \int_0^t \sigma_p(t') dt' \quad . \end{aligned}$$

Als zweites Beispiel betrachten wir ein einfaches dissipatives System, welches den Bewegungsgleichungen

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \quad , \quad \frac{dp}{dt} = -2\gamma p \quad , \quad \gamma = \text{const} \quad , \quad (2.11)$$

genügt. Die anfängliche Phasenraumverteilung sei durch die unkorrelierte Gauß-Verteilung

$$W_0(x, p) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_p} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(p-p_0)^2}{2\sigma_p^2}\right)$$

gegeben. Mit den Anfangswerten x_i, p_i zur Zeit $t = 0$ ergibt sich die Lösung der Bewegungsgleichungen zu

$$p = p_i e^{-2\gamma t} \quad , \quad x = x_i + \frac{p_i}{2\gamma m} (1 - e^{-2\gamma t}) \quad . \quad (2.12)$$

Die (unnormierte) Verteilung folgt durch Einsetzen der Umkehrung der Lösung nach den Anfangswerten in die Ausgangsverteilung,

$$W(x, p, t) = W_0(x_i(x, p, t), p_i(x, p, t)) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_p} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{1}{1-\rho^2(t)} B(x, p, t)\right) \quad ,$$

$$B(x, p, t) = \frac{[x - x_c(t)]^2}{\sigma_x^2(t)} - \frac{2\rho(t)[x - x_c(t)][p - p_c(t)]}{\sigma_x(t)\sigma_p(t)} + \frac{[p - p_c(t)]^2}{\sigma_p^2(t)} \quad ,$$

mit den Parametern

$$x_c(t) = x_0 + \frac{p_0}{2\gamma m} (1 - e^{-2\gamma t}) \quad , \quad p_c(t) = p_0 e^{-2\gamma t} \quad , \quad \rho(t) = \frac{\sigma_p}{\sigma_x(t)} \frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2\gamma m} \quad ,$$

$$\sigma_x(t) = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_p^2 \frac{(1 - e^{-2\gamma t})^2}{(2\gamma m)^2}} \quad , \quad \sigma_p(t) = \sigma_p e^{-2\gamma t} \quad , \quad \frac{1}{1 - \rho^2(t)} = \frac{\sigma_x^2(t)}{\sigma_x^2} \quad .$$

Die Berechnung von $h(x, p, t)$ erfolgt entsprechend (2.10); die Höhenlinienparametrisierung aus $W(x', p', t) = W(x, p, t)$ ergibt hier

$$p' = p_c(t) + \frac{\rho(t)\sigma_p(t)}{\sigma_x(t)} [x' - x_c(t)]$$

$$+ \sigma\sigma_p(t) \sqrt{B(x, p, t) - \frac{(1 - \rho^2(t))}{\sigma_x^2(t)} [x' - x_c(t)]^2} \quad ,$$

wobei $\sigma = \text{sign}\left(p - p_c(t) - \frac{\rho(t)\sigma_p(t)}{\sigma_x(t)} [x - x_c(t)]\right)$ gilt und die Integration bei

$$x_{\min} = x_c(t) - \sigma_x(t) \sqrt{\frac{B(x, p, t)}{1 - \rho^2(t)}}$$

beginnt. Das Ergebnis dieser ist

$$h(x, p, t) = \frac{p^2}{2m} + \gamma [p + p_c(t)] [x - x_c(t)] + \gamma \frac{\sigma_x(t)\sigma_p(t)}{\sqrt{1 - \rho^2(t)}} B(x, p, t) A(x, p, t)$$

$$+ g_1(t, W(x, p, t))$$

mit

$$A(x, p, t) = \arctan \left(\frac{\sigma_p(t) \sqrt{1 - \rho^2(t)} [x - x_c(t)]}{\sigma_x(t) [p - p_c(t)] - \rho(t) \sigma_p(t) [x - x_c(t)]} \right) .$$

Wir setzen wieder $g_1 = 0$ und erhalten damit die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{p}{m} + \frac{2\gamma}{\sigma_p(t) \sqrt{1 - \rho^2(t)}} (\sigma_x(t) [p - p_c(t)] - \rho(t) \sigma_p(t) [x - x_c(t)]) A(x, p, t) , \\ \dot{p} &= -2\gamma p - \frac{2\gamma}{\sigma_x(t) \sqrt{1 - \rho^2(t)}} (\sigma_p(t) [x - x_c(t)] - \sigma_x(t) \rho(t) [p - p_c(t)]) A(x, p, t) . \end{aligned}$$

Sie können durch geeignete Ersetzungen in zwei entkoppelte Gleichungen umgeformt werden. Die Lösung mit den Anfangsbedingungen $x(0), p(0)$ lautet

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 + \sigma_x R \cos \varphi(t) + \frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2\gamma m} (p_0 + \sigma_p R \sin \varphi(t)) , \\ p(t) &= e^{-2\gamma t} (p_0 + \sigma_p R \sin \varphi(t)) \end{aligned}$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} R &= \sqrt{\frac{(x(0) - x_0)^2}{\sigma_x^2} + \frac{(p(0) - p_0)^2}{\sigma_p^2}} , \quad \varphi(t) = \varphi_0 e^{2\gamma t} + \varphi_I(t) , \\ \varphi_0 &= \arctan \left(\frac{p(0) - p_0}{x(0) - x_0} \frac{\sigma_x}{\sigma_p} \right) , \\ \varphi_I(t) &= (e^{2\gamma t} - 1) \left[\frac{\pi}{2} + \arctan \left(\frac{\sigma_x(t) \rho(t)}{\sigma_x} \right) \right] - \frac{\sigma_x}{\sigma_p} \gamma m e^{2\gamma t} \ln \frac{\sigma_x^2(t)}{\sigma_x^2} . \end{aligned}$$

Durch die Vorgabe der Bewegungsgleichungen (2.11) folgen die Ströme J_x und J_p in diesem Fall direkt aus (2.5). Daher sind die Stromlinien mit den klassischen Trajektorien (2.12) identisch. Die normierte Verteilung ergibt sich aus (2.4) mit $D(x, p, t) = \partial(x_i, p_i) / \partial(x, p) = e^{2\gamma t}$.

Der Fall des dissipativen Systems ähnelt dem der unnormierten Verteilung des ersten Beispiels. Ein abnehmendes Produkt von Orts- und Impulsbreite bzw. Fläche der Kovarianzellipse führt zu enger um den Zentralpunkt der Verteilung laufenden Trajektorien, deren reale Flächenverringern durch eine mathematische Mehrdeutigkeit kompensiert wird. Die Vergrößerung eines (lokalen) Maximums führt zur Bildung von Bereichen frei von Trajektorien, eine Verkleinerung zum Verschwinden solcher. Eine Hamiltonsche Formulierung ist daher nur zweckmäßig, wenn Funktionswerte und Flächen erhalten bleiben, vgl. auch Abschnitt 2.5, oder allenfalls lokal anwendbar. In dieser Betrachtung verknüpfen Trajektorien Punkte gleicher Funktionswerte; eine Umeichung der Hamilton-Funktion bewirkt eine verteilungsabhängige Abbildung von Punkten, die die Höhenlinien der Verteilung zu fester Zeit invariant läßt.

2.5 Liouville-Theorem und Eindeutigkeit

Nach dem Liouville-Theorem, vgl. Abschnitt 2.1, bedingt eine Hamilton-Funktion die Flächenerhaltung im Phasenraum. Man kann nun umgekehrt die Frage stellen, welche Konsequenzen die Flächenerhaltung für die Dynamik eines Systems hat. Dazu betrachten wir die Fläche eines Phasenraumgebietes, welches von Punkten einer Verteilung $W(x, p, t)$ gebildet wird, deren Funktionswerte größer als ein vorgegebener, fester Wert W_0 sind,

$$A := \int_{W(x,p,t) \geq W_0} dx dp \quad .$$

Der Rand dieses Gebietes werde durch eine zeitabhängige Parametrisierung beschrieben,

$$W(x, p, t) = W_0 : \quad x_r(s, t), p_r(s, t) \quad , \quad s_a \leq s < s_b \quad ,$$

wobei die Randpunkte beim Durchlaufen ihrer Trajektorien jeweils durch denselben Parameterwert s identifiziert werden sollen, womit

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial x_r}{\partial t} \quad , \quad \frac{dp}{dt} = \frac{\partial p_r}{\partial t}$$

gilt. Ein kleines Flächenstück ΔA am Rand, beschrieben durch Δt und Δs , ist gegeben durch

$$\Delta A = \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial x_r}{\partial t} \Delta t & \frac{\partial x_r}{\partial s} \Delta s \\ \frac{\partial p_r}{\partial t} \Delta t & \frac{\partial p_r}{\partial s} \Delta s \end{array} \right| = \left(\frac{\partial x_r}{\partial t} \frac{\partial p_r}{\partial s} - \frac{\partial p_r}{\partial t} \frac{\partial x_r}{\partial s} \right) \Delta s \Delta t \quad .$$

Die Integration über den Parameter s liefert die zeitliche Änderung der Fläche,

$$\frac{dA}{dt} = \int_{s_a}^{s_b} ds \left(\frac{\partial x_r}{\partial t} \frac{\partial p_r}{\partial s} - \frac{\partial p_r}{\partial t} \frac{\partial x_r}{\partial s} \right) \quad . \quad (2.13)$$

Die totale zeitliche Änderung der Verteilung (entlang einer Trajektorie) ist

$$\frac{dW}{dt} = \frac{\partial W}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial W}{\partial p} \frac{dp}{dt} + \frac{\partial W}{\partial t} \quad .$$

Der Rand des Gebietes wird so verändert, daß die Funktionswerte konstant bleiben, also $W = W_0 = \text{const}$ gilt, wodurch für die Randpunkte die Beziehung

$$\frac{dW}{dt} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial p_r}{\partial t} = - \left(\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial W}{\partial x} \frac{\partial x_r}{\partial t} \right) / \frac{\partial W}{\partial p} \quad (2.14)$$

besteht. Einsetzen in (2.13) ergibt

$$\frac{dA}{dt} = \int_{s_a}^{s_b} ds \left(\frac{\partial W}{\partial t} \bigg/ \frac{\partial W}{\partial p} \right) \frac{\partial x_r}{\partial s} + \int_{s_a}^{s_b} ds \frac{\partial x_r}{\partial t} \left(\frac{\partial p_r}{\partial s} + \left(\frac{\partial W}{\partial x} \bigg/ \frac{\partial W}{\partial p} \right) \frac{\partial x_r}{\partial s} \right) . \quad (2.15)$$

Da sich W entlang des Randes nicht ändert, gilt

$$0 = \left(\frac{dW}{ds} \right)_t = \frac{\partial W}{\partial x} \frac{\partial x_r}{\partial s} + \frac{\partial W}{\partial p} \frac{\partial p_r}{\partial s} ,$$

womit der zweite Integralausdruck in (2.15) verschwindet. Der erste Term läßt sich in ein geschlossenes Randintegral über x umwandeln,

$$\frac{dA}{dt} = \oint_{W(x,p,t)=W_0} \left(\frac{\partial W}{\partial t} \bigg/ \frac{\partial W}{\partial p} \right) dx . \quad (2.16)$$

Wenn man in (2.15) anstelle von $\frac{\partial p_r}{\partial t}$ den entsprechenden Ausdruck für $\frac{\partial x_r}{\partial t}$ aus (2.14) einsetzt, erhält man analog

$$\frac{dA}{dt} = - \oint_{W(x,p,t)=W_0} \left(\frac{\partial W}{\partial t} \bigg/ \frac{\partial W}{\partial x} \right) dp . \quad (2.17)$$

Fordert man Flächenerhaltung, so ist

$$\frac{dA}{dt} = 0$$

für alle W_0 . Somit verschwinden die beiden Randintegrale (2.16) und (2.17). Ein Vergleich mit (2.2) zeigt, daß die Hamilton-Funktion $h(x, p, t)$ dann eine „eindeutige“ Funktion ihrer Variablen wird, weil $h_p(x, p, t)$ in diesem Fall nicht vom gewählten Integrationsweg entlang der Höhenlinien abhängt.

2.6 Der quantenmechanische Phasenraum. Wigner-Verteilungen

Ein quantenmechanisches Analogon zur klassischen Phasenraumverteilung wurde 1932 zuerst durch E. P. Wigner [67] in Form einer Quasi-Wahrscheinlichkeitsdichte eingeführt. Sie entspricht der Weyl-Transformation [66] des Dichte-Operators. Die Wigner-Verteilung für einen reinen Zustand ist gegeben durch

$$W(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \psi^* \left(x + \frac{y}{2}, t \right) \psi \left(x - \frac{y}{2}, t \right) e^{ipy/\hbar} dy , \quad (2.18)$$

für ein Zustandsgemisch mit der Dichtematrix $\hat{\rho}(t)$ durch

$$W(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \left\langle x - \frac{y}{2} \left| \hat{\rho}(t) \right| x + \frac{y}{2} \right\rangle e^{ipy/\hbar} dy .$$

Dabei erstreckt sich die Integration über den gesamten Raum.

Die Wigner-Funktion besitzt einige markante Eigenschaften [31]. Dazu zählen die Reellwertigkeit, die Galilei-Invarianz und die Raumspiegelungs- und Zeitumkehr-Invarianz. Die Verteilung besitzt als Randverteilungen die Orts- und Impulsverteilungen und ist normiert,

$$\int dp W(x, p, t) = |\psi(x, t)|^2 = \langle x | \hat{\rho}(t) | x \rangle \quad , \quad (2.19)$$

$$\int dx W(x, p, t) = |\Phi(p, t)|^2 = \langle p | \hat{\rho}(t) | p \rangle \quad , \quad (2.20)$$

$$\int dx \int dp W(x, p, t) = \text{Tr}(\hat{\rho}(t)) = 1 \quad . \quad (2.21)$$

Sind W_1 und W_2 zwei Wigner-Funktionen der Zustände ψ_1 und ψ_2 , so gilt

$$\begin{aligned} \left| \int dx \psi_1^*(x, t) \psi_2(x, t) \right|^2 &= |\langle \psi_1(t) | \psi_2(t) \rangle|^2 \\ &= 2\pi\hbar \int dx \int dp W_1(x, p, t) W_2(x, p, t) \quad . \end{aligned} \quad (2.22)$$

Im Fall $\psi_1 = \psi_2 = \psi$ ergibt sich die Beziehung

$$\int dx \int dp W^2(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \quad , \quad (2.23)$$

die eine Wigner-Funktion eines reinen Zustands charakterisiert. Der Erwartungswert eines Operators $\hat{A}(\hat{x}, \hat{p})$ ist gegeben durch

$$\int dx \int dp A_W(x, p) W(x, p, t) = \text{Tr}(\hat{\rho}(t) \hat{A}(\hat{x}, \hat{p})) \quad , \quad (2.24)$$

wobei $A_W(x, p)$ der Weyl-transformierte Operator ist,

$$A_W(x, p) = \int dy e^{ipy/\hbar} \left\langle x - \frac{y}{2} \left| \hat{A} \right| x + \frac{y}{2} \right\rangle \quad .$$

Bei kräftefreier Bewegung entspricht die Bewegungsgleichung der klassischen,

$$-\frac{\partial}{\partial t} W(x, p, t) = \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} W(x, p, t) \quad .$$

Für ein System mit N_F Freiheitsgraden lautet die Wigner-Funktion eines $2N_F$ -dimensionalen Phasenraums

$$\begin{aligned} W(x_1, \dots, x_{N_F}; p_1, \dots, p_{N_F}; t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{N_F}} \int \dots \int dy_1 \dots dy_{N_F} \\ &\times \left\langle x_1 - \frac{1}{2}y_1, \dots, x_{N_F} - \frac{1}{2}y_{N_F} \left| \hat{\rho}(t) \right| x_1 + \frac{1}{2}y_1, \dots, x_{N_F} + \frac{1}{2}y_{N_F} \right\rangle e^{(i/\hbar) \sum_{k=1}^{N_F} p_k y_k} \quad . \end{aligned}$$

Im Falle reiner Zustände kann dem eindimensionalen Fall entsprechend das Matrixelement $\langle \dots | \hat{\rho}(t) | \dots \rangle$ des Dichteoperators als das Produkt

$$\psi^* \left(x_1 + \frac{1}{2}y_1, \dots, x_{N_F} + \frac{1}{2}y_{N_F}; t \right) \psi \left(x_1 - \frac{1}{2}y_1, \dots, x_{N_F} - \frac{1}{2}y_{N_F}; t \right)$$

geschrieben werden. Die Integration über alle Impulskoordinaten führt auf die N_F -dimensionale Orts-Randverteilung $\langle x_1, \dots, x_{N_F} | \hat{\rho}(t) | x_1, \dots, x_{N_F} \rangle$ wie umgekehrt die Integration über alle Ortskoordinaten auf die Impuls-Randverteilung $\langle p_1, \dots, p_{N_F} | \hat{\rho}(t) | p_1, \dots, p_{N_F} \rangle$. Wie im eindimensionalen Fall ist die Wigner-Funktion normiert, und die Integration des Produkts der Wigner-Funktion zweier Zustände ψ_1 und ψ_2 über den gesamten Phasenraum ergibt das Betragsquadrat des Überlapps (2.22) der Zustände multipliziert mit $(2\pi\hbar)^{-N_F}$. Diese Größe bildet im entsprechenden Ausdruck zu (2.23) die rechte Seite. Die über die x, p -Variablen eines Freiheitsgrades integrierte Wigner-Funktion, $W' = \iint W dx_j dp_j$, $1 \leq j \leq N_F$, ist die Wigner-Funktion des bzgl. dieser Koordinate kontrahierten Dichteoperators $\hat{\rho}'(t) = \int \langle x_j | \hat{\rho}(t) | x_j \rangle dx_j$ [31]. Bei kräftefreier Bewegung gilt die Bewegungsgleichung

$$-\frac{\partial W}{\partial t} = \sum_{k=1}^{N_F} \frac{p_k}{m_k} \frac{\partial W}{\partial x_k}$$

in Analogie zum klassischen Fall wie in einer Dimension.

Eine allgemeine Phasenraumverteilung ist wegen der Nicht-Kommutativität quantenmechanischer Operatoren nicht eindeutig bestimmt. Je nach den geforderten Eigenschaften können verschiedene Klassen von Verteilungen betrachtet werden [42]. Einige der erwähnten Eigenschaften der Wigner-Funktion bestimmen diese aber bereits eindeutig [31]. Unter Aufgabe einiger Eigenschaften, darunter z. B. der Reellwertigkeit oder der Kompatibilität mit den Randverteilungen, (2.19) und (2.20), aber unter Beibehaltung einer zu (2.24) analogen Beziehung für die Operator-Erwartungswerte, kann eine allgemeine Klasse von Phasenraumverteilungen definiert werden [12, 42]. Unter Einführung einer in ξ und η analytischen Funktion $f(\xi, \eta, t)$ wird eine f -Quasiverteilung $F^f(x, p, t)$ eines reinen Zustands definiert,

$$\begin{aligned} F^f(x, p, t) &= \tag{2.25} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\xi \int d\eta \int dx' \psi^* \left(x' - \frac{\hbar}{2}\eta, t \right) \psi \left(x' + \frac{\hbar}{2}\eta, t \right) f(\xi, \eta, t) e^{i\xi(x'-x) - i\eta p} \quad . \end{aligned}$$

Das f -Symbol A_f eines Operators \hat{A} ist die entsprechende Verallgemeinerung der Weyl-Transformation,

$$A_f(x, p, t) = \frac{\hbar}{2\pi} \int d\xi \int d\eta \operatorname{Tr} \left\{ \hat{A}(\hat{x}, \hat{p}) e^{i\xi\hat{x} + i\eta\hat{p}} f^{-1}(\xi, \eta, t) \right\} e^{-i\xi x - i\eta p} \quad .$$

Für eine Dichtematrix $\rho(t)$ lautet die f -Quasiverteilung

$$\begin{aligned} F^f(x, p, t) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\xi \int d\eta \operatorname{Tr} \left\{ \hat{\rho}(t) e^{i\xi\hat{x} + i\eta\hat{p}} f(\xi, \eta, t) \right\} e^{-i\xi x - i\eta p} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\xi \int d\eta \int dx' \left\langle x' + \frac{\hbar}{2}\eta \left| \hat{\rho}(t) \right| x' - \frac{\hbar}{2}\eta \right\rangle f(\xi, \eta, t) e^{i\xi(x'-x) - i\eta p} \quad . \end{aligned}$$

Diese Transformation ist zu der für Operatoren dual, und die Verwendung von f anstelle von f^{-1} führt auf das duale f -Symbol eines Operators [19, 42].

2.7 Wigner-Verteilungen asymptotischer Streuzustände eindimensionaler Potentiale

Wir betrachten allgemein den Fall von links einlaufender Wellenpakete auf ein räumlich begrenztes Potential. Die Wellenfunktion ist dann gegeben durch [9]

$$\psi(x, t) = \int f(k) \varphi_E(x) e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} dk$$

mit den stationären Streulösungen, vgl. auch Abschnitt B.1,

$$\varphi_E(x) = \begin{cases} e^{ikx} + S_{21}(k)e^{-ikx} & , \quad x < x_L \\ \varphi_V(x) & , \quad x_L \leq x \leq x_R \\ S_{11}(k)e^{ikx} & , \quad x_R < x \end{cases} .$$

Die Wigner-Funktion (2.18) kann in der Form

$$\begin{aligned} W(x, p, t) &= \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dk' f^*(k') \int dk f(k) e^{i \frac{\hbar}{2m} (k'^2 - k^2) t} \int dy e^{ipy/\hbar} \varphi_{E'}^* \left(x + \frac{y}{2} \right) \varphi_E \left(x - \frac{y}{2} \right) \end{aligned}$$

geschrieben werden. Rechts der Potentialbarriere ($x > x_R$) trägt asymptotisch (um die rechtslaufenden Anteile des Wellenpakets herum) nur der rechte Bereich bei. Das innere Integral über y kann in diesem Grenzwert wie folgt behandelt werden:

$$\begin{aligned} & S_{11}^*(k') S_{11}(k) e^{i(k-k')x} \int_{-2(x-x_R)}^{2(x-x_R)} dy e^{ipy/\hbar} e^{-i(k+k')y/2} = \\ &= S_{11}^*(k') S_{11}(k) e^{i(k-k')x} 4 \frac{\sin [(2p/\hbar - k - k')(x - x_R)]}{2p/\hbar - k - k'} \\ &\xrightarrow{x, t \rightarrow +\infty} S_{11}^*(k') S_{11}(k) e^{i(k-k')x} 4\pi \delta(2p/\hbar - k - k') \quad . \end{aligned}$$

Der asymptotische Ausdruck der rechtslaufenden Anteile der Wigner-Verteilung ergibt sich daraus nach einer k -Integration zu

$$\begin{aligned} W_{R,R}(x, p, t) &= \\ &= \frac{4\pi}{2\pi\hbar} \int d\bar{k} f^* \left(\frac{p}{\hbar} - \bar{k} \right) f \left(\frac{p}{\hbar} + \bar{k} \right) S_{11}^* \left(\frac{p}{\hbar} - \bar{k} \right) S_{11} \left(\frac{p}{\hbar} + \bar{k} \right) e^{-2i\bar{k}(pt/m - x)} \quad . \end{aligned}$$

Er besitzt die erwartete Struktur der kräftefreien Bewegung als Funktion der Koordinaten in der Form $(pt/m - x)$ des Arguments, mit dem die Funktionswerte transportiert werden. Das zugehörige freie (asymptotisch einlaufende: $x, t \rightarrow -\infty$) Wellenpaket wird durch eine entsprechende Wigner-Verteilung ohne Faktoren S_{11}, S_{11}^* im Integranden repräsentiert. Für sehr schmale Spektralfunktionen (im Vergleich zur Veränderlichkeit von $S_{11}(k)$) unterscheiden sich die Funktionswerte von einlaufender und transmittierter Verteilung an den Stellen verschwindender Argumente durch einen Faktor $T(k) = |S_{11}(k)|^2 \leq 1$. Im Mittel werden

daher die Funktionswerte der transmittierten Verteilungen um den Faktor des Transmissionskoeffizienten $T(k)$ unterdrückt.

Links der Potentialbarriere ($x < x_L$) ist asymptotisch (um die linkslaufenden Anteile herum für positive Zeiten) nur der Anteil mit S_{21} des linken Bereichs entscheidend. Ein analoger Grenzwert des inneren Integrals ergibt hier

$$\begin{aligned} & S_{21}^*(k') S_{21}(k) e^{-i(k-k')x} \int_{-2(x_L-x)}^{2(x_L-x)} dy e^{ipy/\hbar} e^{i(k+k')y/2} \\ & \xrightarrow{-x, t \rightarrow +\infty} S_{21}^*(k') S_{21}(k) e^{-i(k-k')x} 4\pi \delta(2p/\hbar + k + k') \quad , \end{aligned}$$

womit man für den dort dominierenden Teil der Wigner-Verteilung

$$\begin{aligned} & W_{L,L,+}(x, p, t) = \\ & = \frac{4\pi}{2\pi\hbar} \int d\bar{k} f^* \left(-\frac{p}{\hbar} - \bar{k} \right) f \left(-\frac{p}{\hbar} + \bar{k} \right) S_{21}^* \left(-\frac{p}{\hbar} - \bar{k} \right) S_{21} \left(-\frac{p}{\hbar} + \bar{k} \right) e^{2i\bar{k}(pt/m-x)} \end{aligned}$$

erhält. Es gelten entsprechende Aussagen wie für den transmittierten Teil, wobei die Impulse hier negativ sind und der skalierende Faktor durch den Reflexionskoeffizienten $R(k) = |S_{21}(k)|^2 \leq 1$ gegeben ist.

Zusätzlich enthält die Wigner-Funktion Interferenzterme aufgrund der Autokorrelationsstruktur, die aus den zuvor einzeln betrachteten, auslaufenden Anteilen der Wellenfunktion gebildet werden. Die beitragenden inneren Integrale für diesen Fall werden in üblicher Weise regularisiert und lauten

$$\begin{aligned} & S_{11}^*(k') S_{21}(k) e^{-i(k+k')x} \int_{2\max(x-x_L, x_R-x)}^{\infty} dy e^{ipy/\hbar} e^{i(k-k')y/2} e^{-\epsilon y} \\ & + S_{21}^*(k') S_{11}(k) e^{i(k+k')x} \int_{-\infty}^{-2\max(x-x_L, x_R-x)} dy e^{ipy/\hbar} e^{-i(k-k')y/2} e^{\epsilon y} \\ & \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} S_{11}^*(k') S_{21}(k) e^{-i(k+k')x} \left[\pi \delta \left(\frac{p}{\hbar} + \frac{k-k'}{2} \right) \right. \\ & \quad \left. + e^{i(2p/\hbar + k - k') \max(x-x_L, x_R-x)} \text{iP} \frac{1}{\frac{p}{\hbar} + \frac{k-k'}{2}} \right] \\ & + S_{21}^*(k') S_{11}(k) e^{i(k+k')x} \left[\pi \delta \left(\frac{p}{\hbar} - \frac{k-k'}{2} \right) \right. \\ & \quad \left. - e^{-i(2p/\hbar - k + k') \max(x-x_L, x_R-x)} \text{iP} \frac{1}{\frac{p}{\hbar} - \frac{k-k'}{2}} \right] \quad . \end{aligned}$$

Die Anteile aus den δ -Distributionen liefern den Beitrag

$$\begin{aligned} & W_{L,R,\delta,+}(x, p, t) = \\ & = \frac{4\pi}{2\pi\hbar} \int d\bar{k} \text{Re} \left\{ f^* \left(\bar{k} - \frac{p}{\hbar} \right) f \left(\frac{p}{\hbar} + \bar{k} \right) S_{21}^* \left(\bar{k} - \frac{p}{\hbar} \right) S_{11} \left(\frac{p}{\hbar} + \bar{k} \right) e^{-2i\bar{k}(pt/m-x)} \right\} \end{aligned}$$

zum Interferenzterm. Sie besitzen ebenso wie die anderen Ausdrücke die Abhängigkeit $(pt/m - x)$ von den Koordinaten. Daher werden auch dessen Funktionswerte asymptotisch transportiert. Die Anteile aus den Hauptwertintegralen

tragen asymptotisch ($t \rightarrow \infty$) allenfalls in der gleichen Weise bei, welches eine Konsequenz aus dem alleinigen Bestehen des Wellenpakets, und damit der Wigner-Funktion, aus sich dann frei bewegenden Anteilen ist. Bei stark lokalisierten Spektralverteilungen $f(k)$ treten signifikante Werte ausschließlich für kleine Impulse auf; die Interferenz befindet sich räumlich und im Impuls an den Werten des arithmetischen Mittels der Teilpakete. Dieser Fall wird z. B. durch die Streuung eines Wellenpakets an einer Tunnelbarriere beschrieben, vgl. Bild 2.6.

Ähnlich zum einfachen Fall eines reflektierten und transmittierten Teilwellenpakets finden sich bei mehreren Teilwellenpaketen entsprechende (abhängig von der spektralen Separation ggf. überlappende) Interferenzstrukturen zwischen den einzelnen reflektierten und transmittierten Paketen. Ebenso gibt es zwischen den einzelnen rechts- und linkslaufenden Teilwellenpaketen $W_{R,R}(x, p, t)$ und $W_{L,L,+}(x, p, t)$ Interferenzen zwischen allen Teilen innerhalb einer Gruppe. Diese Situation tritt z. B. bei der Mehrfachreflexion eines Wellenpakets an verschiedenen Barrieren auf, vgl. Bild 2.13.

Separierte Interferenzstrukturen bestehen aus nahe beieinanderliegenden positiven und negativen Streifen und besitzen eine verschwindende integrierte Phasenraumdichte. Eine ursprünglich nichtnegative Phasenraumverteilung eines einlaufenden gaußschen Wellenpaketes besteht also nach der Streuung an einem Potential aus mehreren Teilen mit i. a. kleineren Maximalwerten und Interferenzstrukturen mit negativen Anteilen. Daher gilt das Liouville-Theorem nicht für Wigner-Verteilungen. Dieses wurde am analytischen Beispiel der (nichtlokal) gekoppelten niedrigsten beiden Zustände des harmonischen Oszillators gezeigt [51] und z. B. bei der Untersuchung des Zeit-Propagators für einen anharmonischen Oszillator verifiziert [27]. Wie in [42] bemerkt, ist die Wigner-Verteilung eines reinen Zustands genau dann nichtnegativ, wenn die zugehörige Wellenfunktion eine Gauß-Funktion ist, sowohl in einer Dimension des Konfigurationsraums [33] als auch in mehreren Dimensionen [56]. Darüber hinaus verliert eine Wellenfunktion ihre anfängliche gaußsche Form, wenn die Bewegung innerhalb eines Potentials mit einer Koordinatenabhängigkeit verläuft, die stärker als quadratisch ist, wodurch die zugehörige Wigner-Funktion negative Anteile erhält [57].

Die auftretenden Interferenzen zwischen Teilwellenpaketen bewerkstelligen die Korrelation bzw. Kohärenz zwischen diesen und sind direkt verknüpft mit der Reinheit des Zustands. Im Ausdruck (2.23) kompensieren sie quadriert die kleinere quadrierte Norm der Teilwellenpakete. In der Zeitumkehr eines Streuvorgangs z. B. leisten sie die kohärente Zusammenführung einzelner Teile.

Phasenraumflächen bleiben damit im Gegensatz zum klassischen Fall im quantenmechanischen Phasenraum nicht erhalten; im klassischen Limes ($\hbar \rightarrow 0$) gelten schließlich wieder die klassischen Gesetze. Man kann die Frage stellen, was an die Stelle des klassischen Flächenerhaltungssatzes tritt, also z. B. ob sich ein beliebiger Quantenzustand mittels eines zeitabhängigen Potentials in einen anderen beliebigen Quantenzustand überführen läßt, und wenn ja, ob dies in endlicher Zeit oder nur zeitlich asymptotisch möglich ist. Bei dieser Fragestellung

spielt die Zustandsreinheit eine bedeutende Rolle – diese Größe bleibt bei einer solchen Transformation erhalten. Man kann z. B. mittels parametrischer Oszillation kohärente Zustände verschiedener Breiten in endlicher Zeit ineinander überführen, siehe Anhang C. Diese Zustände können zwar auf dem Phasenraum-Niveau auch klassisch verstanden werden, andererseits kann man fragen, inwieweit daraus konstruktive (evtl. approximative) Methoden zur Bestimmung eines zeitabhängigen Überführungspotentials abgeleitet werden könnten.

2.8 Zeitentwicklung und Ströme der Wigner-Verteilung

Die zeitliche Entwicklung einer Wigner-Funktion wird durch die Wigner–Moyal-Gleichung [31]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} W(x, p, t) = & -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} W(x, p, t) \\ & + \frac{i}{2\pi\hbar^2} \int dy \left[V\left(x + \frac{y}{2}\right) - V\left(x - \frac{y}{2}\right) \right] \psi^*\left(x + \frac{y}{2}, t\right) \psi\left(x - \frac{y}{2}, t\right) e^{ipy/\hbar} \end{aligned} \quad (2.26)$$

beschrieben. Die Zeitableitung besteht aus zwei Termen, die aus dem kinetischen und potentiellen Teil der Schrödinger-Gleichung herrühren. Für analytische Potentiale läßt sich das Integral des zweiten Terms in eine Potenzreihe entwickeln, womit dieser Term in Form der Reihe [31]

$$\sum_{\lambda \text{ ungerade}} \frac{1}{\lambda!} \left(\frac{\hbar}{2i}\right)^{\lambda-1} \frac{\partial^\lambda V(x)}{\partial x^\lambda} \frac{\partial^\lambda W(x, p, t)}{\partial p^\lambda} \quad (2.27)$$

dargestellt werden kann. Mit Hilfe des sog. Poisson-Operators

$$\Lambda = \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial x} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial x} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p} \quad ,$$

wobei die mit $\overleftarrow{\partial}$ und $\overrightarrow{\partial}$ markierten Differentiationen jeweils nur auf Terme wirken, die sich links bzw. rechts des Operators befinden, nimmt die Zeitentwicklungsgleichung die kompakte Form

$$\frac{\partial}{\partial t} W(x, p, t) + \frac{2}{\hbar} H(x, p) \sin\left(\frac{\hbar\Lambda}{2}\right) W(x, p, t) = 0 \quad (2.28)$$

an. Dabei ist $H(x, p)$ die Hamilton-Funktion.¹

¹Im allgemeinen ist dies der Weyl-transformierte Hamilton-Operator, in dem symmetrisierte Operator-Produkte erscheinen; im üblichen Falle additiv separierter Variablen aber entspricht sie der klassischen Hamilton-Funktion.

Im Sinne einer hydrodynamischen Formulierung im Phasenraum schreiben wir die Zeitentwicklung in Form einer Kontinuitätsgleichung entsprechend (2.6) im klassischen Fall,

$$\frac{\partial}{\partial t}W(x, p, t) + \frac{\partial}{\partial x}J_x(x, p, t) + \frac{\partial}{\partial p}J_p(x, p, t) = 0 \quad . \quad (2.29)$$

Die Wigner–Moyal-Gleichung (2.26) impliziert zu einem gewissen Grad die Struktur der Ströme, so daß die in Abschnitt 2.3 beschriebene Eichfreiheit eingeschränkt werden kann. Eine zu (2.26) kompatible Definition des Stroms J_x ist

$$J_x(x, p, t) := \frac{p}{m}W(x, p, t) \quad , \quad (2.30)$$

so daß der entsprechende Term dort durch $\partial J_x/\partial x$ repräsentiert wird. Durch diese Festlegung ergibt sich J_p aus obiger Gleichung unter der Randbedingung des Verschwindens im Unendlichen.

Die Erfüllbarkeit eines solchen Ansatzes mit Randbedingung ist nicht immer gewährleistet, vgl. auch Abschnitt 2.4. Als Beispiel betrachten wir die Wigner-Funktion des in [51], Gl. (20), angegebenen Modells,

$$\begin{aligned} W(x, p, t) &= \frac{1}{\pi\hbar}e^{-(X^2+P^2)} \\ &\times \left\{ 1 + \frac{4U_0^2}{1+4U_0^2}(1 - \cos \tau) \left(X^2 - 1 + P^2 - \frac{X}{\sqrt{2}U_0} \right) - \frac{2\sqrt{2}PU_0}{\sqrt{1+4U_0^2}} \sin \tau \right\} \quad , \\ \tau &= \omega\sqrt{1+4U_0^2}t \quad , \quad X = \alpha x \quad , \quad P = \frac{p}{\hbar\alpha} \quad , \quad \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar} \quad . \end{aligned}$$

Mit dem betrachteten Ansatz verbleibt in J_p ein Term $\sim \text{erf}(P)$, so daß die geforderte Randbedingung nicht eingehalten wird. Die Randbedingung alleine läßt sich z. B. mit dem Ansatz

$$\begin{aligned} J_x^{(s)}(x, p, t) &= \frac{1}{\pi\hbar}e^{-(X^2+P^2)} \frac{U_0^2}{\sqrt{1+4U_0^2}} \frac{2\omega}{\alpha} \left(X - \frac{1}{\sqrt{2}U_0} \right) \sin \tau \quad , \\ J_p^{(s)}(x, p, t) &= \frac{1}{\pi\hbar}e^{-(X^2+P^2)} \frac{U_0^2}{\sqrt{1+4U_0^2}} 2\hbar\alpha\omega \left(\frac{1}{\sqrt{2}U_0} \cos \tau - P \sin \tau \right) \end{aligned}$$

erfüllen.

Mit dem Ansatz (2.30) für J_x kann J_p durch (unbestimmte, d. h. Festlegung der Integrationskonstanten) p -Integration des Integralausdrucks in (2.26) gewonnen werden,

$$\begin{aligned} J_p(x, p, t) &= \\ &= -\frac{\hbar}{2\pi\hbar^2} \int dy \frac{1}{y} \left[V\left(x + \frac{y}{2}\right) - V\left(x - \frac{y}{2}\right) \right] \psi^*\left(x + \frac{y}{2}, t\right) \psi\left(x - \frac{y}{2}, t\right) e^{ipy/\hbar} \quad . \end{aligned} \quad (2.31)$$

In gleicher Weise kann mit der Reihendarstellung (2.27) verfahren werden, womit sich

$$J_p(x, p, t) = - \sum_{\lambda \text{ ungerade}} \frac{1}{\lambda!} \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^{\lambda-1} \frac{\partial^\lambda V(x)}{\partial x^\lambda} \frac{\partial^{\lambda-1} W(x, p, t)}{\partial p^{\lambda-1}} \quad (2.32)$$

ergibt. Durch diese Wahl von J_x und J_p wird die Randbedingung (einerseits für stetige und andererseits für analytische Potentiale) bereits erfüllt, vgl. auch Abschnitt 2.9.1.

Im allgemeinen Fall (2.28) werden ebenfalls Ausdrücke für J_x und J_p durch die Form der Gleichung impliziert. Diese lauten

$$\begin{aligned} J_x(x, p, t) &= \frac{\partial H(x, p)}{\partial p} \left[\frac{\sin\left(\frac{\hbar\Lambda}{2}\right)}{\frac{\hbar\Lambda}{2}} \right] W(x, p, t) \quad , \\ J_p(x, p, t) &= -\frac{\partial H(x, p)}{\partial x} \left[\frac{\sin\left(\frac{\hbar\Lambda}{2}\right)}{\frac{\hbar\Lambda}{2}} \right] W(x, p, t) \end{aligned}$$

und lassen sich direkt durch Einsetzen in (2.29) verifizieren.

Trotz der oben beschriebenen (heuristischen) Einschränkung der Eichfreiheit der Ströme J_x und J_p bleibt eine Umeichung nach (2.7) prinzipiell möglich. Aus der Struktur von (2.32) können z. B. Funktionen $K_\lambda(x, p, t)$ als Reihenglieder einer Umeichung entnommen werden, die sich an den bereits vorhandenen Strömen orientieren,

$$\begin{aligned} K_\lambda(x, p, t) &= \frac{1}{\lambda!} \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^{\lambda-1} \frac{\partial^{\lambda-1} V(x)}{\partial x^{\lambda-1}} \frac{\partial^{\lambda-1} W(x, p, t)}{\partial p^{\lambda-1}} \quad , \\ K(x, p, t) &= \sum_{\lambda>1} \alpha_\lambda K_\lambda(x, p, t) \quad . \end{aligned}$$

Asymptotische Eigenschaften sind in diesem Fall gegebenenfalls durch Überlagerung entsprechender Reihenglieder zu konstruieren. Durch diese Wahl möglicher Umeichungen bleibt auch der klassische Grenzwert ($\hbar \rightarrow 0$) erhalten, vgl. auch [54]. Der klassische Grenzwert der Wigner–Moyal-Gleichung (2.26) unter Verwendung der Reihenentwicklung (2.27) ist i. a. mit geeigneten Wellenpaketen durchzuführen, weil die Wigner-Verteilung intern von \hbar abhängt [28].

2.9 Wigner-Verteilungen gebundener Zustände eindimensionaler Stufenpotentiale

Die Wellenfunktion gebundener Zustände im Stufenpotential ist gegeben durch, vgl. Anhang B,

$$\psi(x, t) = \begin{cases} \psi_1(x, t) & , \quad x \leq x_1 = x_0 \\ \vdots & \\ \psi_J(x, t) & , \quad x_{J-1} < x \leq x_J \\ \vdots & \\ \psi_N(x, t) & , \quad x > x_{N-1} \end{cases} \quad (2.33)$$

mit den Ausdrücken

$$\psi_J(x, t) = \sum_{n=1}^{N_B} \left(\alpha_n^{(J)} e^{ik_n^{(J)}(x-x_{J-1})} + \beta_n^{(J)} e^{-ik_n^{(J)}(x-x_{J-1})} \right) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (2.34)$$

für die einzelnen Bereiche J , $1 \leq J \leq N$. Zur Kompaktifizierung der Darstellung schreiben wir die Terme der Wellenfunktion (2.34) mittels einer Summe,

$$\psi_J(x, t) = \sum_{n=1}^{N_B} e^{-iE_n t/\hbar} \sum_{\sigma=\pm 1} \gamma_{\sigma,n}^{(J)} e^{i\sigma k_n^{(J)}(x-x_{J-1})} \quad , \quad \gamma_{+1,n}^{(J)} = \alpha_n^{(J)} \quad , \quad \gamma_{-1,n}^{(J)} = \beta_n^{(J)} \quad , \quad (2.35)$$

die Gesamtwellenfunktion wird mittels Sprungfunktionen geschrieben,

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \sum_{J=1}^N [\Theta(x - \tilde{x}_{J-1}) - \Theta(x - \tilde{x}_J)] \psi_J(x, t) \\ &= \sum_{J=1}^N [\Theta(x - \tilde{x}_{J-1}) - \Theta(x - \tilde{x}_J)] \sum_{n=1}^{N_B} e^{-iE_n t/\hbar} \sum_{\sigma=\pm 1} \gamma_{\sigma,n}^{(J)} e^{i\sigma k_n^{(J)}(x-x_{J-1})} \quad . \end{aligned}$$

Aufgrund der Randbereiche, die sich links ($J = 1$) und rechts ($J = N$) jeweils über die gesamte Halbachse erstrecken können, werden die Intervallgrenzen \tilde{x}_i eingeführt, die für $1 \leq i \leq N - 1$ mit x_i übereinstimmen und für $i = 0, N$ den Grenzwerten $\tilde{x}_0 \rightarrow -\infty$, $\tilde{x}_N \rightarrow \infty$ entsprechen. Die Sprungfunktionen am Rand sind damit wie folgt zu ersetzen: $\Theta(x - \tilde{x}_0) \rightarrow 1$, $\Theta(x - \tilde{x}_N) \rightarrow 0$.

Die zugehörige Wigner-Funktion lautet

$$\begin{aligned} W(x, p, t) &= \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \chi(x, J_1, J_2) \int_{x_a(x, J_1, J_2)}^{x_b(x, J_1, J_2)} \psi_{J_1}^* \left(x + \frac{y}{2}, t \right) \psi_{J_2} \left(x - \frac{y}{2}, t \right) e^{ipy/\hbar} dy \quad . \end{aligned}$$

Die Integralgrenzen $x_a(x, J_1, J_2)$ und $x_b(x, J_1, J_2)$ wie der Träger des Gebiets jedes Summanden, beschrieben durch $\chi(x, J_1, J_2)$, bestimmen sich aus den Gültigkeitsbereichen der Wellenfunktion. Für die Integralgrenzen gilt

$$\begin{aligned} \tilde{x}_{J_1-1} < x + \frac{y}{2} \leq \tilde{x}_{J_1} & \quad , \quad \tilde{x}_{J_2-1} < x - \frac{y}{2} \leq \tilde{x}_{J_2} \quad \rightarrow \\ 2(\tilde{x}_{J_1-1} - x) < y \leq 2(\tilde{x}_{J_1} - x) & \quad , \quad -2(\tilde{x}_{J_2} - x) \leq y < -2(\tilde{x}_{J_2-1} - x) \quad , \\ x_a(x, J_1, J_2) \geq 2(\tilde{x}_{J_1-1} - x) & \quad , \quad x_a(x, J_1, J_2) \geq -2(\tilde{x}_{J_2} - x) \quad \rightarrow \\ x_a(x, J_1, J_2) &= \max(2(\tilde{x}_{J_1-1} - x), 2(x - \tilde{x}_{J_2})) \\ &= \tilde{x}_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2} + |2x - \tilde{x}_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2}| \quad , \quad (2.36) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_b(x, J_1, J_2) &\leq 2(\tilde{x}_{J_1} - x) \quad , \quad x_b(x, J_1, J_2) \leq -2(\tilde{x}_{J_2-1} - x) \quad \rightarrow \\
x_b(x, J_1, J_2) &= \min(2(\tilde{x}_{J_1} - x), 2(x - \tilde{x}_{J_2-1})) \\
&= \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_2-1} - |2x - \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_2-1}| \quad . \quad (2.37)
\end{aligned}$$

In den Randbereichen ergeben sich für die Integralgrenzen die Spezialfälle $x_a(x, 1, J_2) = 2(x - \tilde{x}_{J_2})$, $x_b(x, J_1, 1) = 2(\tilde{x}_{J_1} - x)$, $x_a(x, J_1, N) = 2(\tilde{x}_{J_1-1} - x)$, $x_b(x, N, J_2) = 2(x - \tilde{x}_{J_2-1})$, $x_a(x, 1, N) \rightarrow -\infty$ $x_b(x, N, 1) \rightarrow \infty$. Die charakteristische Funktion $\chi(x, J_1, J_2)$ folgt aus der Bedingung

$$\begin{aligned}
x_a(x, J_1, J_2) &\leq x_b(x, J_1, J_2) \quad , \\
\tilde{x}_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2} + |2x - \tilde{x}_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2}| &\leq \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_2-1} - |2x - \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_2-1}| \quad , \\
|2x - \tilde{x}_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2}| + |2x - \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_2-1}| &\leq \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2} - \tilde{x}_{J_2-1} \quad . \quad (2.38)
\end{aligned}$$

Die Nullstellen der Argumente der Betragsfunktionen, $x = (\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2})/2$ und $x = (\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1})/2$, befinden sich innerhalb der betrachteten Gebiete, denn die Bedingung (2.38) für diese Fälle,

$$|\tilde{x}_{J_2} - \tilde{x}_{J_2-1} - (\tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_1-1})| \leq \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2} - \tilde{x}_{J_2-1} \quad ,$$

ist stets erfüllt für $\tilde{x}_{J_1-1} \leq \tilde{x}_{J_1}$ und $\tilde{x}_{J_2-1} \leq \tilde{x}_{J_2}$. Zwischen den Nullstellen ist die Summe der Beträge auf der linken Seite der Relation (2.38) konstant, so daß das gesamte Intervall Bestandteil des Gebietes ist. Rechts beider Nullstellen folgt

$$\begin{aligned}
2x - \tilde{x}_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2} + 2x - \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_2-1} &\leq \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2} - \tilde{x}_{J_2-1} \quad , \\
x &\leq (\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})/2
\end{aligned}$$

und links derer

$$\begin{aligned}
-(2x - \tilde{x}_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2}) - (2x - \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_2-1}) &\leq \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2} - \tilde{x}_{J_2-1} \quad , \\
x &\geq (\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})/2 \quad .
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich die charakteristische Funktion zu

$$\chi(x, J_1, J_2) = \Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})) - \Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})) \quad . \quad (2.39)$$

Die Spezialfälle an den Rändern lauten $\chi(x, J_1 = 1, J_2) = \chi(x, J_1, J_2 = 1) = 1 - \Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2}))$, $\chi(x, J_1 = N, J_2) = \chi(x, J_1, J_2 = N) = \Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1}))$ und $\chi(x, 1, N) = \chi(x, N, 1) = 1$.

Der explizite Ausdruck für die Wigner-Funktion eines gebundenen Zustands lautet damit

$$\begin{aligned}
W(x, p, t) &= \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \chi(x, J_1, J_2) \int_{x_a(x, J_1, J_2)}^{x_b(x, J_1, J_2)} \sum_{n_1=1}^{N_B} \left(\sum_{\sigma_1=\pm 1} \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (x + \frac{y}{2} - x_{J_1-1})} \right) \\
&\quad \times \sum_{n_2=1}^{N_B} \left(\sum_{\sigma_2=\pm 1} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (x - \frac{y}{2} - x_{J_2-1})} \right) e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} e^{i\frac{p}{\hbar}y} dy
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \chi(x, J_1, J_2) \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \int_{x_a(x, J_1, J_2)}^{x_b(x, J_1, J_2)} dy \\
&\quad \times \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)} e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (x - x_{J_1-1}) + i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (x - x_{J_2-1})} e^{i(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}))y} \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \chi(x, J_1, J_2) \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)} \\
&\quad \times e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (x - x_{J_1-1}) + i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (x - x_{J_2-1})} \frac{e^{i(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}))y} \Big|_{y=x_a(x, J_1, J_2)}^{y=x_b(x, J_1, J_2)}}{i(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}))} \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \left[\Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})) - \Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})) \right] \\
&\quad \times \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \frac{\gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)}}{i(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}))} \\
&\quad \times \left(e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (x + \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (x - \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1})} e^{i\frac{p}{\hbar} x_b(x, J_1, J_2)} \right. \\
&\quad \left. - e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (x + \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (x - \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1})} e^{i\frac{p}{\hbar} x_a(x, J_1, J_2)} \right) .
\end{aligned} \tag{2.40}$$

Im Falle von verschwindenden Nennern im obigen Ausdruck innerhalb der Summen über σ_1, σ_2 sind Terme der Art $(e^{i\lambda x_b} - e^{i\lambda x_a})/(i\lambda)$ für $\lambda \rightarrow 0$ durch die Grenzwerte $x_b - x_a$ zu ersetzen,

$$\begin{aligned}
&\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}) \rightarrow 0 : \\
&\rightarrow \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)} e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (x - x_{J_1-1}) + i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (x - x_{J_2-1})} (x_b(x, J_1, J_2) - x_a(x, J_1, J_2)) .
\end{aligned}$$

2.9.1 Ströme und Stufenpotentiale

Im folgenden werden die entsprechenden Terme des Abschnitts 2.8 für Wigner-Funktionen der Wellenfunktionen von Stufenpotentialen berechnet. Für die Zeitableitung der Wigner-Funktion erhält man:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} W(x, p, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \left[\Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})) - \Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})) \right] \\
&\quad \times \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \frac{E_{n_2} - E_{n_1}}{i\hbar} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \frac{\gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)}}{i(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}))}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \left(e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \left(x + \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1}\right)} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} \left(x - \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1}\right)} e^{i\frac{p}{\hbar} x_b(x, J_1, J_2)} \right. \\ & \left. - e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \left(x + \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1}\right)} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} \left(x - \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1}\right)} e^{i\frac{p}{\hbar} x_a(x, J_1, J_2)} \right) . \end{aligned} \quad (2.41)$$

Die Ortsableitung des Stroms J_x ergibt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} J_x(x, p, t) &= \frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} W(x, p, t) = \\ &= \frac{p}{m} \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \\ & \times \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \frac{(\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} - \sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*}) \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)}}{\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)})} \\ & \times \left(e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \left(x + \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1}\right)} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} \left(x - \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1}\right)} e^{i\frac{p}{\hbar} x_b(x, J_1, J_2)} \right. \\ & \left. - e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \left(x + \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1}\right)} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} \left(x - \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1}\right)} e^{i\frac{p}{\hbar} x_a(x, J_1, J_2)} \right) \\ & + T \left(\frac{\partial}{\partial x} x_a(x, J_1, J_2), \frac{\partial}{\partial x} x_b(x, J_1, J_2) \right) . \end{aligned} \quad (2.42)$$

Die Ableitungen der Stufenfunktionen der charakteristischen Funktionen geben keinen Beitrag, weil W ein Ortsintegral einer (i. a.) stetigen Funktion ist. Die Zusatzterme T , die sich aus den Ableitungen der Integralgrenzen ergeben, werden nun gesondert betrachtet. Aus (2.36) und (2.37) folgt

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} x_a(x, J_1, J_2) &= 2 \operatorname{sign}(2x - \tilde{x}_{J_2} - \tilde{x}_{J_1-1}) , \\ \frac{\partial}{\partial x} x_b(x, J_1, J_2) &= -2 \operatorname{sign}(2x - \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_2-1}) . \end{aligned}$$

Einsetzen dieser Ausdrücke und Verwendung von (2.35) ergibt

$$\begin{aligned} T \left(\frac{\partial}{\partial x} x_a(x, J_1, J_2), \frac{\partial}{\partial x} x_b(x, J_1, J_2) \right) &= \\ &= -2 \frac{p}{m} \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \\ & \times \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)} \\ & \times \left(e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \left(x + \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1}\right)} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} \left(x - \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1}\right)} \right. \\ & \left. \times e^{i\frac{p}{\hbar} x_b(x, J_1, J_2)} \operatorname{sign}(2x - \tilde{x}_{J_2} - \tilde{x}_{J_1-1}) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)} \left(x + \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1}\right)} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} \left(x - \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1}\right)} \\
& \quad \times e^{i\frac{p}{\hbar} x_a(x, J_1, J_2)} \operatorname{sign}(2x - \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_2-1}) \\
= & -2 \frac{p}{m} \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \\
& \times \left[\psi_{J_1}^* \left(x + \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2}, t\right) \psi_{J_2} \left(x - \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2}, t\right) \right. \\
& \quad \times e^{i\frac{p}{\hbar} x_b(x, J_1, J_2)} \operatorname{sign}(2x - \tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_2-1}) \\
& \quad + \psi_{J_1}^* \left(x + \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2}, t\right) \psi_{J_2} \left(x - \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2}, t\right) \\
& \quad \left. \times e^{i\frac{p}{\hbar} x_a(x, J_1, J_2)} \operatorname{sign}(2x - \tilde{x}_{J_2} - \tilde{x}_{J_1-1}) \right] .
\end{aligned}$$

Die Orts-Argumente der Funktionen, die die Integrationsgrenzen $x_a(x, J_1, J_2)$ und $x_b(x, J_1, J_2)$ enthalten und sich aus (2.36) und (2.37) ergeben, lauten explizit

$$\begin{aligned}
x_a(x, J_1, J_2) &= \left\{ \begin{array}{l} 2(x - \tilde{x}_{J_2}) \\ 2(\tilde{x}_{J_1-1} - x) \end{array} \right\}_a, & x_b(x, J_1, J_2) &= \left\{ \begin{array}{l} 2(\tilde{x}_{J_1} - x) \\ 2(x - \tilde{x}_{J_2-1}) \end{array} \right\}_b, \\
x + \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} &= \left\{ \begin{array}{l} 2x - \tilde{x}_{J_2} \\ \tilde{x}_{J_1-1} \end{array} \right\}_a, & x - \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} &= \left\{ \begin{array}{l} \tilde{x}_{J_2} \\ 2x - \tilde{x}_{J_1-1} \end{array} \right\}_a, \\
x + \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} &= \left\{ \begin{array}{l} \tilde{x}_{J_1} \\ 2x - \tilde{x}_{J_2-1} \end{array} \right\}_b, & x - \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} &= \left\{ \begin{array}{l} 2x - \tilde{x}_{J_1} \\ \tilde{x}_{J_2-1} \end{array} \right\}_b.
\end{aligned} \tag{2.43}$$

Dabei bedeuten $\{\cdot\}_a$ und $\{\cdot\}_b$, daß das obere oder untere Argument für

$$(a) : x \left\{ \begin{array}{l} \geq \\ < \end{array} \right\} \frac{\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2}}{2} \quad \text{bzw.} \quad (b) : x \left\{ \begin{array}{l} \geq \\ < \end{array} \right\} \frac{\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1}}{2}$$

zu wählen ist. Durch Verwenden dieser Ausdrücke und im folgenden durch Verwendung von Sprungfunktionen erhält man

$$\begin{aligned}
T \left(\frac{\partial}{\partial x} x_a(x, J_1, J_2), \frac{\partial}{\partial x} x_b(x, J_1, J_2) \right) &= \\
= & -2 \frac{p}{m} \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \\
& \times \left[\psi_{J_1}^* \left(\left\{ \begin{array}{l} \tilde{x}_{J_1} \\ 2x - \tilde{x}_{J_2-1} \end{array} \right\}_b, t \right) \psi_{J_2} \left(\left\{ \begin{array}{l} 2x - \tilde{x}_{J_1} \\ \tilde{x}_{J_2-1} \end{array} \right\}_b, t \right) \right. \\
& \quad \times \exp \left(i \frac{p}{\hbar} \left\{ \begin{array}{l} 2(\tilde{x}_{J_1} - x) \\ 2(x - \tilde{x}_{J_2-1}) \end{array} \right\}_b \right) \left\{ \begin{array}{l} +1 \\ -1 \end{array} \right\}_b \\
& \quad + \psi_{J_1}^* \left(\left\{ \begin{array}{l} 2x - \tilde{x}_{J_2} \\ \tilde{x}_{J_1-1} \end{array} \right\}_a, t \right) \psi_{J_2} \left(\left\{ \begin{array}{l} \tilde{x}_{J_2} \\ 2x - \tilde{x}_{J_1-1} \end{array} \right\}_a, t \right) \\
& \quad \left. \times \exp \left(i \frac{p}{\hbar} \left\{ \begin{array}{l} 2(x - \tilde{x}_{J_2}) \\ 2(\tilde{x}_{J_1-1} - x) \end{array} \right\}_a \right) \left\{ \begin{array}{l} +1 \\ -1 \end{array} \right\}_a \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -2 \frac{p}{m} \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \\
&\quad \times \left[\psi_{J_1}^*(\tilde{x}_{J_1}, t) \psi_{J_2}(2x - \tilde{x}_{J_1}, t) e^{i\frac{p}{\hbar}2(\tilde{x}_{J_1}-x)} \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) \right. \\
&\quad - \psi_{J_1}^*(2x - \tilde{x}_{J_2-1}, t) \psi_{J_2}(\tilde{x}_{J_2-1}, t) e^{i\frac{p}{\hbar}2(x-\tilde{x}_{J_2-1})} \Theta\left(\frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1}) - x\right) \\
&\quad + \psi_{J_1}^*(2x - \tilde{x}_{J_2}, t) \psi_{J_2}(\tilde{x}_{J_2}, t) e^{i\frac{p}{\hbar}2(x-\tilde{x}_{J_2})} \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \\
&\quad \left. - \psi_{J_1}^*(\tilde{x}_{J_1-1}, t) \psi_{J_2}(2x - \tilde{x}_{J_1-1}, t) e^{i\frac{p}{\hbar}2(\tilde{x}_{J_1-1}-x)} \Theta\left(\frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2}) - x\right) \right] .
\end{aligned}$$

Wegen $\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1} < \tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1}$, $\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2} < \tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2}$ gilt für die Produkte der Sprungfunktionen

$$\begin{aligned}
&\left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) = \\
&\quad = \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) , \\
&\left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \Theta\left(\frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1}) - x\right) = \\
&\quad = \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) \\
&\quad \xrightarrow{J_2 \rightarrow J_2+1} \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) , \\
&\left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2})\right) = \\
&\quad = \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) , \\
&\left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \Theta\left(\frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2}) - x\right) = \\
&\quad = \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \\
&\quad \xrightarrow{J_1 \rightarrow J_1+1} \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) . \tag{2.44}
\end{aligned}$$

Der 1. und (für $J_1 \rightarrow J_1 + 1$) 4. Summand sowie der 2. und 3. (für $J_2 \rightarrow J_2 + 1$) kann damit jeweils auf dem gleichen Intervall von 0 verschieden sein. Mit der Stetigkeit der Wellenfunktion, $\psi_J(\tilde{x}_J, t) = \psi_{J+1}(\tilde{x}_J, t)$ ($\tilde{x}_i = x_i$, $i \neq 0, N$), werden die Terme durch die betrachtete Indexverschiebung entgegengesetzt gleich, womit die entsprechenden Terme einander wegheben für $J_1, J_2 \neq 1, N$. Am Rand verschwinden dagegen die Wellenfunktionen der gebundenen Zustände, $\psi_1(\tilde{x}_0, t) = \psi_N(\tilde{x}_N, t) = 0$, womit der gesamte Zusatzterm T aus (2.42) verschwindet,

$$T \left(\frac{\partial}{\partial x} x_a(x, J_1, J_2), \frac{\partial}{\partial x} x_b(x, J_1, J_2) \right) = 0 .$$

Die Impulsableitung des Stroms J_p ergibt sich aus Gleichung (2.29) unter Verwendung der expliziten Ausdrücke (2.41) und (2.42),

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial p} J_p(x, p, t) &= -\frac{\partial}{\partial t} W(x, p, t) - \frac{\partial}{\partial x} J_x(x, p, t) = \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \\
&\quad \times \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \frac{\gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)}}{\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)})} \\
&\quad \times \left(\frac{E_{n_2} - E_{n_1}}{\hbar} - \frac{p}{m} (\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} - \sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*}) \right) \\
&\quad \times \left(e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (x + \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (x - \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1})} e^{i\frac{p}{\hbar} x_b(x, J_1, J_2)} \right. \\
&\quad \left. - e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (x + \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (x - \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1})} e^{i\frac{p}{\hbar} x_a(x, J_1, J_2)} \right) .
\end{aligned}$$

In der Integration dieser Gleichung nach p treten Integranden der Form

$$\begin{aligned}
&\frac{E_\Delta/\hbar - pk_\Delta/m}{p/\hbar - k_\Sigma} e^{i(p/\hbar - k_\Sigma)x_{a,b}} , \\
&E_\Delta = E_{n_2} - E_{n_1} , \quad k_\Delta = \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} - \sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} , \\
&k_\Sigma = \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}) , \quad x_{a,b} = x_{a,b}(x, J_1, J_2) ,
\end{aligned}$$

auf, die auf Exponentialintegrale führen,

$$\begin{aligned}
&\int \frac{E_\Delta/\hbar - pk_\Delta/m}{p/\hbar - k_\Sigma} e^{i(p/\hbar - k_\Sigma)x_{a,b}} dp = \\
&= \left(\frac{\hbar^2 k_\Delta k_\Sigma}{m} - E_\Delta \right) E_1(-i(p/\hbar - k_\Sigma)x_{a,b}) + i \frac{\hbar^2 k_\Delta}{m x_{a,b}} e^{i(p/\hbar - k_\Sigma)x_{a,b}} + \text{const} ,
\end{aligned}$$

mit

$$E_1(x) = \int_1^\infty \frac{e^{-xt}}{t} dt$$

und

$$\frac{\hbar^2 k_\Delta k_\Sigma}{m} - E_\Delta = \frac{\hbar^2}{2m} ((k_{n_2}^{(J_2)})^2 - (k_{n_1}^{(J_1)*})^2) - (E_{n_2} - E_{n_1}) = V^{(J_1)} - V^{(J_2)} .$$

Damit schreibt sich die Impulsstromdichte als

$$\begin{aligned}
J_p(x, p, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \\
&\quad \times \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)} e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (x - x_{J_1-1})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (x - x_{J_2-1})}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left\{ \left(V^{(J_1)} - V^{(J_2)} \right) \left[E_1 \left(-i \left(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2} (\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}) \right) x_b(x, J_1, J_2) \right) \right. \right. \\
& \quad \left. \left. - E_1 \left(-i \left(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2} (\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}) \right) x_a(x, J_1, J_2) \right) \right] \right. \\
& \quad \left. + i \frac{\hbar^2}{m} (\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} - \sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*}) \left[\frac{e^{i \left(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2} (\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}) \right) x_b(x, J_1, J_2)}}{x_b(x, J_1, J_2)} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. - \frac{e^{i \left(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2} (\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}) \right) x_a(x, J_1, J_2)}}{x_a(x, J_1, J_2)} \right] \right\} \\
& + c(x, t) \quad . \tag{2.45}
\end{aligned}$$

Die Integrationskonstante $c(x, t)$ ist so zu bestimmen, daß $\lim_{p \rightarrow \pm\infty} J(x, p, t) = 0$ gilt oder $J(x, p, t)$ für große $|p|$ um 0 oszilliert.

Wir betrachten zunächst die Integralgrenzen $x_a(x, J_1, J_2)$ und $x_b(x, J_1, J_2)$ näher, die nach (2.36) bzw. (2.37) für $x = \tilde{x}_{J_1-1}$ oder $x = \tilde{x}_{J_2}$ bzw. $x = \tilde{x}_{J_1}$ oder $x = \tilde{x}_{J_2-1}$ den Wert 0 annehmen können und damit zu singulären Ausdrücken führen können. Nach (2.36) gilt (für hinreichend kleine Δx)

$$\begin{aligned}
& x_a(\tilde{x}_{J_1-1} + \Delta x, J_1, J_2) = \tilde{x}_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2} + |2\Delta x + \tilde{x}_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2}| = \\
& \tilde{x}_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2} + |-2\Delta x + \tilde{x}_{J_2} - \tilde{x}_{J_1-1}| = x_a(\tilde{x}_{J_2} - \Delta x, J_1, J_2) = \\
& = \begin{cases} -2\Delta x & , \quad \tilde{x}_{J_2} > \tilde{x}_{J_1-1} & , \quad J_2 > J_1 - 1 \\ |2\Delta x| & , \quad & , \quad J_2 = J_1 - 1 \\ 2(\tilde{x}_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2} + \Delta x) & , \quad \tilde{x}_{J_2} < \tilde{x}_{J_1-1} & , \quad J_2 < J_1 - 1 \end{cases} .
\end{aligned}$$

Aus den Gültigkeitsbereichen (2.39) der Terme ergibt sich

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1}) \leq \tilde{x}_{J_1-1} + \Delta x \leq \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2}) \quad , \\
& (1) \quad -\frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2-1}) \leq \Delta x \leq \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2} - 2\tilde{x}_{J_1-1}) \quad , \\
& \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1}) \leq \tilde{x}_{J_2} - \Delta x \leq \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2}) \quad , \\
& (2) \quad \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1} - 2\tilde{x}_{J_2}) \leq -\Delta x \leq \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} - \tilde{x}_{J_2}) \quad .
\end{aligned}$$

Um verschwindende Δx zu erhalten, muß im Fall (1) die linke Seite der Ungleichung kleiner und im Fall (2) die rechte Seite größer als 0 sein, womit jeweils $J_1 \geq J_2$ folgt. Zusammen mit der vorigen Bedingung folgt

$$J_1 - 1 \leq J_2 \leq J_1 \quad \text{bzw.} \quad J_2 \leq J_1 \leq J_2 + 1 \tag{2.46}$$

für mögliche verschwindende Werte von $x_a(x, J_1, J_2)$. In diesen Fällen ist die rechte Seite von (1) positiv und die linke Seite von (2) negativ. Eine entsprechende Betrachtung für $x_b(x, J_1, J_2)$ führt auf die Bedingung

$$J_2 - 1 \leq J_1 \leq J_2 \quad \text{bzw.} \quad J_1 \leq J_2 \leq J_1 + 1 \quad . \tag{2.47}$$

Für die Ausdrücke mit $1/x_a(x, J_1, J_2)$ und $1/x_b(x, J_1, J_2)$, die z. T. singular sind, ist es zweckmäßig, deren Gesamtheit zu betrachten,

$$\begin{aligned}
J_{p,s}^{(J_1, J_2)}(x, p, t) &:= \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \\
&\times \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)} i \frac{\hbar^2}{m} \left(\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} - \sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \right) \\
&\times \left(\frac{e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \left(x + \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1}\right)} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} \left(x - \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1}\right)} e^{i\frac{p}{\hbar} x_b(x, J_1, J_2)}}{x_b(x, J_1, J_2)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \left(x + \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1}\right)} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} \left(x - \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1}\right)} e^{i\frac{p}{\hbar} x_a(x, J_1, J_2)}}{x_a(x, J_1, J_2)} \right).
\end{aligned}$$

Durch Einsetzen der expliziten Ausdrücke (2.43) und unter Verwendung der zugehörigen Sprungfunktionen (2.44) wie oben folgt

$$\begin{aligned}
J_{p,s}^{(J_1, J_2)}(x, p, t) &= \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) \right] \frac{e^{i2p(x - \tilde{x}_{J_2-1})/\hbar}}{2(x - \tilde{x}_{J_2-1})} \\
&\times \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)} i \frac{\hbar^2}{m} \left(\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} - \sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \right) \\
&\quad \times e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (2x - x_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2-1})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (\tilde{x}_{J_2-1} - x_{J_2-1})} \\
&+ \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \frac{e^{i2p(\tilde{x}_{J_1} - x)/\hbar}}{2(\tilde{x}_{J_1} - x)} \\
&\times \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)} i \frac{\hbar^2}{m} \left(\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} - \sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \right) \\
&\quad \times e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (\tilde{x}_{J_1} - x_{J_1-1})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (2x - \tilde{x}_{J_1} - x_{J_2-1})} \\
&- \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \frac{e^{i2p(\tilde{x}_{J_1-1} - x)/\hbar}}{2(\tilde{x}_{J_1-1} - x)} \\
&\times \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)} i \frac{\hbar^2}{m} \left(\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} - \sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \right) \\
&\quad \times e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (\tilde{x}_{J_1-1} - x_{J_1-1})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (2x - \tilde{x}_{J_1-1} - x_{J_2-1})} \\
&- \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \frac{e^{i2p(x - \tilde{x}_{J_2})/\hbar}}{2(x - \tilde{x}_{J_2})} \\
&\times \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)} i \frac{\hbar^2}{m} \left(\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} - \sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \right) \\
&\quad \times e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (2x - x_{J_1-1} - \tilde{x}_{J_2})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (\tilde{x}_{J_2} - x_{J_2-1})}.
\end{aligned}$$

Unter Verwendung der Wellenfunktion (2.35) und deren Ortsableitung (mit ' bezeichnet) folgt weiter

$$\begin{aligned}
J_{p,s}^{(J_1, J_2)}(x, p, t) &= \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})) - \Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1})) \right] \frac{e^{i2p(x-\tilde{x}_{J_2-1})/\hbar}}{2(x - \tilde{x}_{J_2-1})} \\
(1) \quad &\times \frac{\hbar^2}{m} \left[\psi_{J_1}^*(2x - \tilde{x}_{J_2-1}, t) \psi'_{J_2}(\tilde{x}_{J_2-1}, t) + \psi_{J_1}'^*(2x - \tilde{x}_{J_2-1}, t) \psi_{J_2}(\tilde{x}_{J_2-1}, t) \right] \\
&+ \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2-1})) - \Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})) \right] \frac{e^{i2p(\tilde{x}_{J_1}-x)/\hbar}}{2(\tilde{x}_{J_1} - x)} \\
(2) \quad &\times \frac{\hbar^2}{m} \left[\psi_{J_1}^*(\tilde{x}_{J_1}, t) \psi'_{J_2}(2x - \tilde{x}_{J_1}, t) + \psi_{J_1}'^*(\tilde{x}_{J_1}, t) \psi_{J_2}(2x - \tilde{x}_{J_1}, t) \right] \\
&- \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})) - \Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2})) \right] \frac{e^{i2p(\tilde{x}_{J_1-1}-x)/\hbar}}{2(\tilde{x}_{J_1-1} - x)} \\
(3) \quad &\times \frac{\hbar^2}{m} \left[\psi_{J_1}^*(\tilde{x}_{J_1-1}, t) \psi'_{J_2}(2x - \tilde{x}_{J_1-1}, t) + \psi_{J_1}'^*(\tilde{x}_{J_1-1}, t) \psi_{J_2}(2x - \tilde{x}_{J_1-1}, t) \right] \\
&- \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2})) - \Theta(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})) \right] \frac{e^{i2p(x-\tilde{x}_{J_2})/\hbar}}{2(x - \tilde{x}_{J_2})} \\
(4) \quad &\times \frac{\hbar^2}{m} \left[\psi_{J_1}^*(2x - \tilde{x}_{J_2}, t) \psi'_{J_2}(\tilde{x}_{J_2}, t) + \psi_{J_1}'^*(2x - \tilde{x}_{J_2}, t) \psi_{J_2}(\tilde{x}_{J_2}, t) \right] .
\end{aligned}$$

Werden die einzelnen Terme (i) dieses Ausdrucks mit $T_{J_p}(J_1, J_2, i)$ bezeichnet, so gilt wegen der Stetigkeitsbedingungen $\psi_J(\tilde{x}_J, t) = \psi_{J+1}(\tilde{x}_J, t)$, $\psi'_J(\tilde{x}_J, t) = \psi'_{J+1}(\tilde{x}_J, t)$ der Wellenfunktionen bei endlichen Potentialsprüngen

$$T_{J_p}(J_1, J_2, 4) + T_{J_p}(J_1, J_2 + 1, 1) = 0 \quad \text{und} \quad T_{J_p}(J_1, J_2, 2) + T_{J_p}(J_1 + 1, J_2, 3) = 0 \quad ,$$

womit diese Terme sich bis auf mögliche Randterme (unendliches Potential, Einschluß im tiefen Kasten)

$$T_{J_p}(J_1, J_{\min}, 1), T_{J_p}(J_1, J_{\max}, 4), T_{J_p}(J_{\min}, J_2, 3), T_{J_p}(J_{\max}, J_2, 2)$$

wegheben. Die verbleibende Summe lautet damit

$$\begin{aligned}
J_{p,s}(x, p, t) &= \sum_{J_1, J_2=1}^N J_{p,s}^{(J_1, J_2)}(x, p, t) = \\
&= \sum_{J=1}^N \left[T_{J_p}(J, J_{\min}, 1) + T_{J_p}(J_{\min}, J, 3) + T_{J_p}(J_{\max}, J, 2) + T_{J_p}(J, J_{\max}, 4) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\hbar^2}{m} \sum_{J=1}^N \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_{\min-1}} + \tilde{x}_{J-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_{\min-1}} + \tilde{x}_J)\right) \right] \\
&\quad \times \left[\frac{e^{i2p(x-\tilde{x}_{J_{\min-1}})/\hbar}}{2(x-\tilde{x}_{J_{\min-1}})} \psi_J^*(2x-\tilde{x}_{J_{\min-1}}, t) \psi'_{J_{\min}}(\tilde{x}_{J_{\min-1}}, t) \right. \\
&\quad \left. - \frac{e^{i2p(\tilde{x}_{J_{\min-1}}-x)/\hbar}}{2(\tilde{x}_{J_{\min-1}}-x)} \psi'_{J_{\min}}(\tilde{x}_{J_{\min-1}}, t) \psi_J(2x-\tilde{x}_{J_{\min-1}}, t) \right] \\
&+ \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\hbar^2}{m} \sum_{J=1}^N \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_{\max}} + \tilde{x}_{J-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_{\max}} + \tilde{x}_J)\right) \right] \\
&\quad \times \left[\frac{e^{i2p(\tilde{x}_{J_{\max}}-x)/\hbar}}{2(\tilde{x}_{J_{\max}}-x)} \psi'_{J_{\max}}(\tilde{x}_{J_{\max}}, t) \psi_J(2x-\tilde{x}_{J_{\max}}, t) \right. \\
&\quad \left. - \frac{e^{i2p(x-\tilde{x}_{J_{\max}})/\hbar}}{2(x-\tilde{x}_{J_{\max}})} \psi_J^*(2x-\tilde{x}_{J_{\max}}, t) \psi'_{J_{\max}}(\tilde{x}_{J_{\max}}, t) \right] \quad , \quad (2.48)
\end{aligned}$$

wobei das Verschwinden der Wellenfunktion an den Rändern berücksichtigt wurde. Liegen Randpunkte des physikalischen Systems im Endlichen (Randbedingung durch eine unendlich hohe Potentialwand), so besitzt die Wellenfunktion bei $x = \tilde{x}_{J_{\min-1}}$ oder $x = \tilde{x}_{J_{\max}}$ (z. B. $J_{\min} = 2$, $J_{\max} = N - 1$) eine Nullstelle 1. Ordnung, so daß $J_{p,s}(x, p, t)$ an diesen Stellen gegen eine zeitabhängige Konstante strebt. Dabei tragen aufgrund der Stufenfunktionen nur die Summanden mit $J = J_{\min}$ bzw. $J = J_{\max}$ bei, und man erhält (mit $\tilde{x}_{J_{\min-1}} = x_{J_{\min-1}}$, $\tilde{x}_{J_{\max}} = x_{J_{\max}}$)

$$\lim_{x \searrow x_{J_{\min-1}}} J_{p,s}(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\hbar^2}{m} 2 \left| \psi'_{J_{\min}}(x_{J_{\min-1}}, t) \right|^2 \quad , \quad (2.49)$$

$$\lim_{x \nearrow x_{J_{\max}}} J_{p,s}(x, p, t) = -\frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\hbar^2}{m} 2 \left| \psi'_{J_{\max}}(x_{J_{\max}}, t) \right|^2 \quad . \quad (2.50)$$

Ohne solche Randbedingungen im Endlichen verschwindet der Stromanteil (2.48).

Die Exponentialintegrale in (2.45) besitzen logarithmische Singularitäten für verschwindende Argumente,

$$E_1(z) = -\ln z - \gamma_E + \mathcal{O}(z) \quad , \quad \gamma_E: \text{Eulersche Konstante} \quad ;$$

die Argumente verschwinden insbesondere an den Potentialstufen, $x = \tilde{x}_{J-1} = x_{J-1}$. Mögliche Nullstellen der p -abhängigen Faktoren führen nicht zu Singularitäten, weil jeweils zwei gleichartige logarithmische Ausdrücke mit verschiedenem Vorzeichen auftreten, die sich im Grenzfalle zu $-\ln(x_b(x, J_1, J_2)/x_a(x, J_1, J_2))$ reduzieren. Wegen (2.46) und (2.47) und $J_1 \neq J_2$ aufgrund der in der Summe auftretenden Potentialdifferenz tragen zu gegebenem $x = \tilde{x}_{J-1}$ nur die beiden Terme mit $x_a(x, J, J-1) = 2|x - \tilde{x}_{J-1}|$ und $x_b(x, J-1, J) = -2|x - \tilde{x}_{J-1}|$ zum logarithmisch singulären Teil bei,

$$\begin{aligned}
J_{p,\ln}^{(J)}(x, p, t) &\simeq \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J-2} + \tilde{x}_{J-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J-1} + \tilde{x}_J)\right) \right] \\
&\times \left(V^{(J)} - V^{(J-1)} \right) \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \\
&\times \left[\sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J-1)} e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J)*} (x - x_{J-1})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J-1)} (x - x_{J-2})} \right. \\
&\times \ln \left(-i \left(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J-1)}) \right) 2|x - \tilde{x}_{J-1}| \right) \\
&+ \sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J-1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J)} e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J-1)*} (x - x_{J-2})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J)} (x - x_{J-1})} \\
&\left. \times \ln \left(i \left(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J-1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J)}) \right) 2|x - \tilde{x}_{J-1}| \right) \right] .
\end{aligned}$$

Da die konstanten und p -abhängigen Faktoren in den Argumenten der Logarithmen nicht zur Singularität beitragen, werden diese durch eine dimensionsbehaftete Konstante $c_k^{(J)}$ ersetzt. Die verbleibenden Summen werden, nachdem in den Argumenten der Exponentialfunktionen x durch \tilde{x}_{J-1} ersetzt wird, mit (2.35) zusammengefaßt:

$$\begin{aligned}
J_{p,\ln}^{(J)}(x, p, t) &\simeq \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J-2} + \tilde{x}_{J-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J-1} + \tilde{x}_J)\right) \right] \\
&\times \left(V^{(J)} - V^{(J-1)} \right) \ln \left(c_k^{(J)} |x - \tilde{x}_{J-1}| \right) \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \\
&\times \left[\sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J-1)} e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J)*} (x - x_{J-1})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J-1)} (x - x_{J-2})} \right. \\
&+ \sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J-1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J)} e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J-1)*} (x - x_{J-2})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J)} (x - x_{J-1})} \left. \right]_{x=\tilde{x}_{J-1}} \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J-2} + \tilde{x}_{J-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J-1} + \tilde{x}_J)\right) \right] \left(V^{(J)} - V^{(J-1)} \right) \\
&\times 2 |\psi_J(\tilde{x}_{J-1}, t)|^2 \ln \left(c_k^{(J)} |x - \tilde{x}_{J-1}| \right) , \tag{2.51}
\end{aligned}$$

wobei die Stetigkeit von ψ verwandt wurde. Dieses Resultat kann als Näherungsausdruck für (2.45) in der Nähe von $x = \tilde{x}_{J-1} = x_{J-1}$ angesehen werden.

Für große Argumente besitzt das Exponentialintegral die asymptotische Entwicklung

$$E_1(z) \xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} \frac{e^{-z}}{z} .$$

Außerhalb der Potentialstufen ($x \neq x_J = \tilde{x}_J$, $J = 1, \dots, N-1$) sind $x_a(x, J_1, J_2)$ und $x_b(x, J_1, J_2)$ von 0 verschieden. Damit verschwinden in (2.45) die Grenzwerte

der Exponentialintegrale fast überall für $p \rightarrow \pm\infty$. Die restlichen Terme, die bei Randbedingungen im Endlichen auftreten, oszillieren um 0 für den betrachteten Grenzwert und $x \neq x_{J_{\min}-1}, x_{J_{\max}}$. Also verschwindet die sich in (2.45) befindende Integrationskonstante unter der Forderung, daß die Impulsstromdichte im Unendlichen verschwinden soll,

$$c(x, t) = 0 \quad .$$

Bei den Ausnahmewerten (Potentialstufen) handelt es sich um einzelne Punkte und nicht um Intervalle, und die Singularitäten sind nicht „distributionswertig“, so daß die Dichte mit dem Verschwinden für große Impulse verträglich ist.

2.9.2 Numerische Implementierung

Die Streuung von Wellenpaketen an Potentialbarrieren wird innerhalb eines das System umgebenden Kastens mit unendlich hohen Wänden beschrieben, um die Anzahl der beitragenden Eigenfunktionen, die in die Ausdrücke für die Wigner-Funktion und die abgeleiteten Größen quadratisch eingeht, bei einer vorgegebenen numerischen Genauigkeit der Approximation möglichst niedrig zu halten. Für alle dargestellten Größen werden die zugrundeliegenden Eigenfunktionen mit der in Abschnitt B.2 beschriebenen Methode der Eigenwertsuche berechnet, insbesondere die Eigenfunktionen des tiefen Kastens in Abschnitt 2.9.3 wie auch approximativ die Funktionen aus Abschnitt 2.9.6 mit einer geeignet hoch gewählten Mittelbarriere, die damit ebenfalls die Grundlage der in Abschnitt 2.12 dargestellten Trajektorien bilden. Die Eigenwertsuche selbst aus Abschnitt B.2 erfolgt in doppelter Genauigkeit im IEEE-Standard für Gleitkommazahlen.

Als Anfangsbedingung für ein Wellenpaket wird ein anfänglich unkorreliertes gaußsches Wellenpaket verwendet, dessen Zerlegung in die Eigenfunktionen des Systems in Abschnitt B.3 beschrieben wird. Dabei treten in den hier betrachteten Fällen nur die diskreten Terme aus (B.8) auf. Die Integration zur Berechnung der Überlappintegrale wird dabei auf das Intervall $[x_0 - \lambda_\sigma \sigma_{x_0}, x_0 + \lambda_\sigma \sigma_{x_0}]$ beschränkt, wobei der Wert für λ_σ , dessen Voreinstellung $\lambda_\sigma = 5$ ist, frei vorgegeben werden kann. Das Energieintervall für die Eigenwertsuche wird anfänglich auf $[V_{\min} + (\max(0, |p_0| - \lambda_\sigma \sigma_p))^2 / (2m), V_{\max} + (|p_0| + \lambda_\sigma \sigma_p)^2 / (2m)]$ festgelegt, wobei V_{\min} und V_{\max} die auf dem Ortsintervall der Integration existierenden minimalen und maximalen Potentialwerte sind. (Eigenzustände anstelle von Wellenpaketen werden an dieser Stelle gesondert durch die Anpassung des Energieintervalls auf das Gesamtminimum des Potentials einerseits und auf das asymptotische Minimum oder den vorgegebenen Maximalwert andererseits berechnet.) Damit das hier angegebene Energieintervall den Hauptteil des Beitrags zum Wellenpaket umfaßt, sollte der Anfangsortserwartungswert x_0 möglichst viele Orts-Standardabweichungen σ_{x_0} von der nächsten Potentialstufe und aufgrund der Zerlegung in jedem Fall vom Rand des tiefen Kastens entfernt sein, vgl. auch

Abschnitt B.4 über die Größe der asymptotischen Beiträge an solchen Potentialstufen.

Zuerst wird die Anzahl der gebundenen Zustände innerhalb des Energieintervalls berechnet. Ist diese größer als die Maximalzahl der speicherbaren gebundenen Zustände (hier 4096), so wird die obere Intervallgrenze so lange linear interpolierend verkleinert, bis die Maximalzahl nicht mehr überschritten wird. Danach werden (schrittweise in kleineren Anzahlen von bis zu 100) die Energieeigenwerte berechnet und umgespeichert, worauf die Koeffizienten der Exponentialfunktionen nach Anhang B berechnet und normiert werden und der Überlapp der Eigenfunktionen mit dem Wellenpaket nach Abschnitt B.3 berechnet wird. Das Betragsquadrat dieses Überlapps wird sowohl gespeichert als auch aufsummiert. Im Fall eines umgebenden unendlich tiefen Kastens (hier zutreffend) und noch freiem Speicherplatz (die obere Energieintervallgrenze wurde z. B. nicht bereits verringert) wird, falls die Summe der Betragsquadrate der Überlappe um mehr als $\varepsilon = 10^{-3}$ von 1 abweicht, die obere Energieintervallgrenze (aufgrund des asymptotischen Energieabstands im tiefen Kasten skalierend mit der Quadrat der Iterationsnummer) erhöht. (Ähnliche Vorgehensweisen gibt es im Fall von Streuzuständen, wobei anstelle einer Änderung des Energieintervalls die Integrations- bzw. Summationsschrittweite der Impulsintegration halbiert wird, vgl. Abschnitt B.3.) Es werden in der Folge die Energieeigenwerte vernachlässigt, deren Beitrag zur Summe der Betragsquadrate der Überlappe mit dem Wellenpaket kleiner als $\varepsilon_{\text{Eig.}}/N_{\text{Eig.}}$ ist, wobei $N_{\text{Eig.}}$ die Zahl der berechneten Eigenfunktionen und $\varepsilon_{\text{Eig.}}$ ein setzbarer Parameter mit einer Voreinstellung von 10^{-3} ist. (Die Gesamtzahl der letztendlich beitragenden Eigenfunktionen wird hier auf einen Wert von 4096 beschränkt.)

Die Wigner-Funktion $W(x, p, t)$ ist als Doppelsumme über n_1, n_2 in der Form (2.40) programmiert mit den in der Folge dieser Gleichung angegebenen Ersetzungen bei singulären Ausdrücken, wobei die Integralgrenzen x_a und x_b durch (2.36) und (2.37) gegeben sind. Dabei werden die Zeitfaktoren für einen Summationsindex in einem linearen Feld abgespeichert. Für die Berechnung der Impulsstromdichte wird (2.45) verwendet. Die Exponentialintegrale werden mittels der CERN-Bibliotheksfunktion [37] berechnet. In der Nähe der Singularität wird das Exponentialintegral E_1 durch den Logarithmus des Arguments approximiert und in direkter Nähe dieser durch einen großen negativen Konstantwert. Für große Argumente bietet sich aus Gründen der Rechengeschwindigkeit eine asymptotische Entwicklung der Form [26] 8.215 an, wobei die Anzahl der Summanden 16 beträgt und der Realteil des Arguments größer als 16 ist. Da die anderen Terme für die inneren Potentiale nicht beitragen, vgl. Abschnitt 2.9.1, werden diese Terme nicht berücksichtigt. Ein Summenbeitrag in (2.45) wird nur hinzugefügt, wenn man sich (unter Beachtung der jeweiligen Gültigkeitsbereiche) mit einem der beiden Summationsindizes J_1, J_2 in den Randbereichen befindet, siehe (2.48), und aus Gründen der Einfachheit $|x_a|, |x_b| > 10^{-8}$ gilt.

Weite Teile der Rechnung erfolgen in doppelter Genauigkeit des IEEE-Standards für Gleitkommazahlen, die eine relative Genauigkeit von ca. $2 \cdot 10^{-16}$ besitzen. Auch dieser Programmteil ist in FORTRAN77 (Standard) kodiert, wobei der programmiertechnische Gesamtumfang von Eigenwertsuche in Abschnitt B.2, Trajektorien-Berechnung in Abschnitt 2.11 und Darstellung wie Berechnung der Wigner-Funktion sowie der Ströme über 3000 Zeilen umfaßt.

2.9.3 Eigenzustände im tiefen Kasten

Mit den Bezeichnungen

$$k_n = \frac{n\pi}{d} \quad , \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$$

für Wellenzahl und Energie des n -ten Eigenzustands schreibt sich die Wellenfunktion (2.33) als

$$\varphi_{E_n}(x) = \begin{cases} \varphi_{E_n,1} = 0 & , \quad x \leq 0 = x_1 \\ \varphi_{E_n,2} = \frac{1}{i\sqrt{2d}} \left(e^{ik_n x} - e^{-ik_n x} \right) & , \quad 0 < x < d = x_2 \\ \varphi_{E_n,3} = 0 & , \quad x \geq d \end{cases} \quad ,$$

$$\psi_J(x, t) = \varphi_{E_n, J}(x) e^{-iE_n t / \hbar} \quad .$$

Die zugehörigen nichtverschwindenden Koeffizienten aus (2.34) und die Integralgrenzen (2.36), (2.37) lauten

$$\alpha_n^{(2)} = \frac{1}{i\sqrt{2d}} = -\beta_n^{(2)} \quad , \quad x_a(x, 2, 2) = |2x - d| - d = -x_b(x, 2, 2) \quad .$$

Die Wigner-Funktion (2.40) für diesen Fall ergibt sich zu, vgl. z. B. [44, 42],

$$W(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} [\Theta(x) - \Theta(x - d)] \frac{1}{d} \left[\frac{1}{\frac{p}{\hbar} - \frac{n\pi}{d}} \sin \left(\left(\frac{p}{\hbar} - \frac{n\pi}{d} \right) (d - |2x - d|) \right) \right. \\ \left. - \frac{2}{\frac{p}{\hbar}} \cos \left(2\frac{n\pi}{d} x \right) \sin \left(\frac{p}{\hbar} (d - |2x - d|) \right) + \frac{1}{\frac{p}{\hbar} + \frac{n\pi}{d}} \sin \left(\left(\frac{p}{\hbar} + \frac{n\pi}{d} \right) (d - |2x - d|) \right) \right] \quad , \quad (2.52)$$

und die Impulsstromdichte ergibt sich nach (2.45) zu

$$J_p(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{\hbar^2 4n\pi}{m} \frac{1}{d^2} \frac{1}{d - |2x - d|} \sin \left(2\frac{n\pi}{d} x \right) \cos \left(\frac{p}{\hbar} (d - |2x - d|) \right) \quad . \quad (2.53)$$

Bild 2.1 zeigt die Wigner-Funktion (2.52) und die Stromdichten $J_x(x, p, t)$ (2.30) und $J_p(x, p, t)$ (2.53) des Grundzustandes des tiefen Kastens. Die Wigner-Funktion dieses Zustandes besitzt ein zentrales Maximum. Für $|p| > 2\pi\hbar/d$ existieren Bereiche mit negativen Werten, die sich mit wachsenden Werten von $|p|$

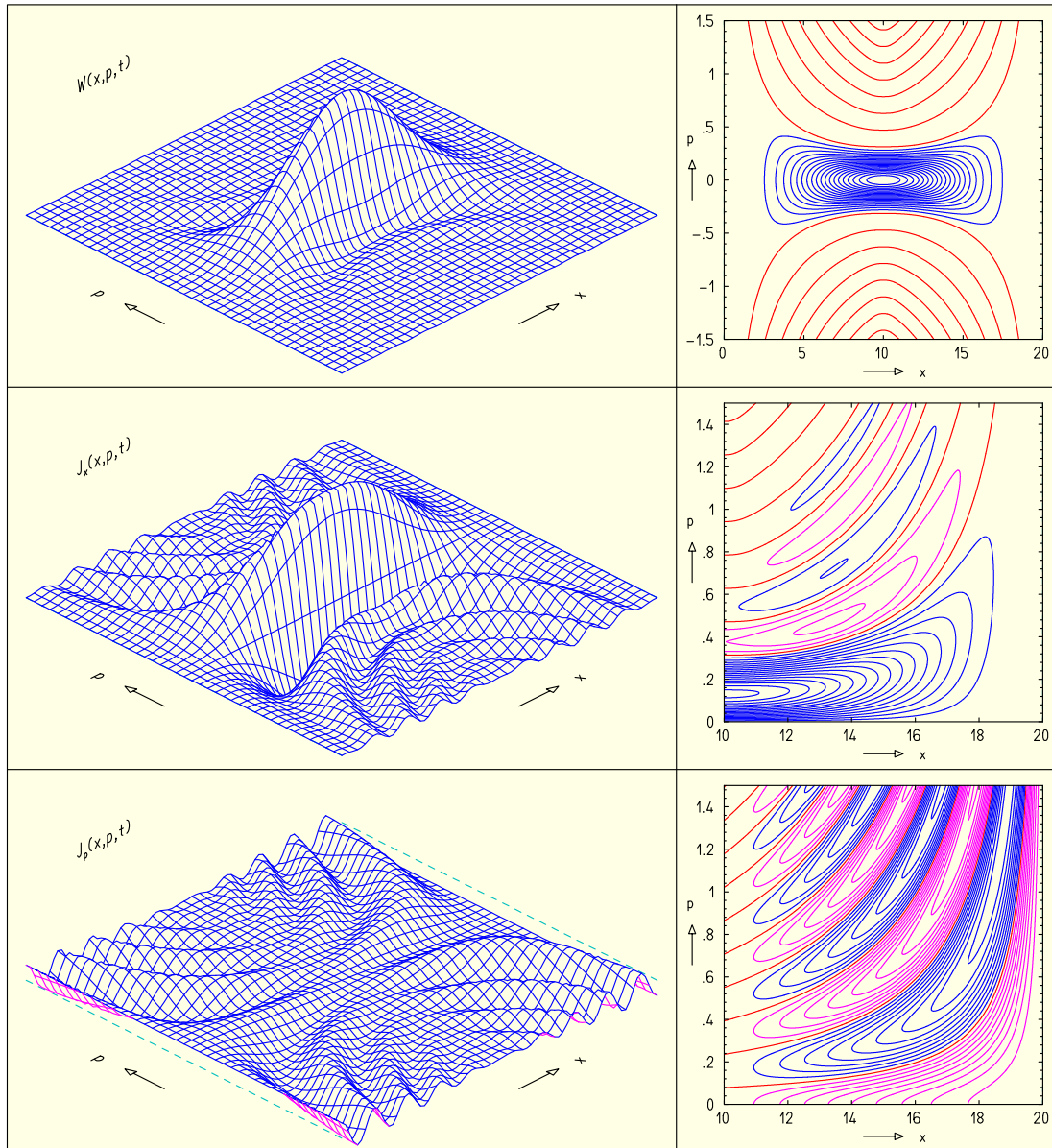


Abbildung 2.1: Wigner-Funktion (2.52) des Grundzustandes ($n = 1$) des tiefen Kastens (erste Zeile) und zugehörige Stromdichten $J_x(x, p, t)$ und $J_p(x, p, t)$ (2.53) (zweite bzw. dritte Zeile). Die Konturzeichnungen der Stromdichten sind auf den Bereich $x \geq d/2$, $p \geq 0$ beschränkt; hier gelten die Symmetriebeziehungen $J_x(x, p, t) = J_x(d-x, p, t) = -J_x(x, -p, t)$ und $J_p(x, p, t) = -J_p(d-x, p, t) = J_p(x, -p, t)$. Die Parameter sind $d = 20$, $\hbar = 1$, $m = 1$.

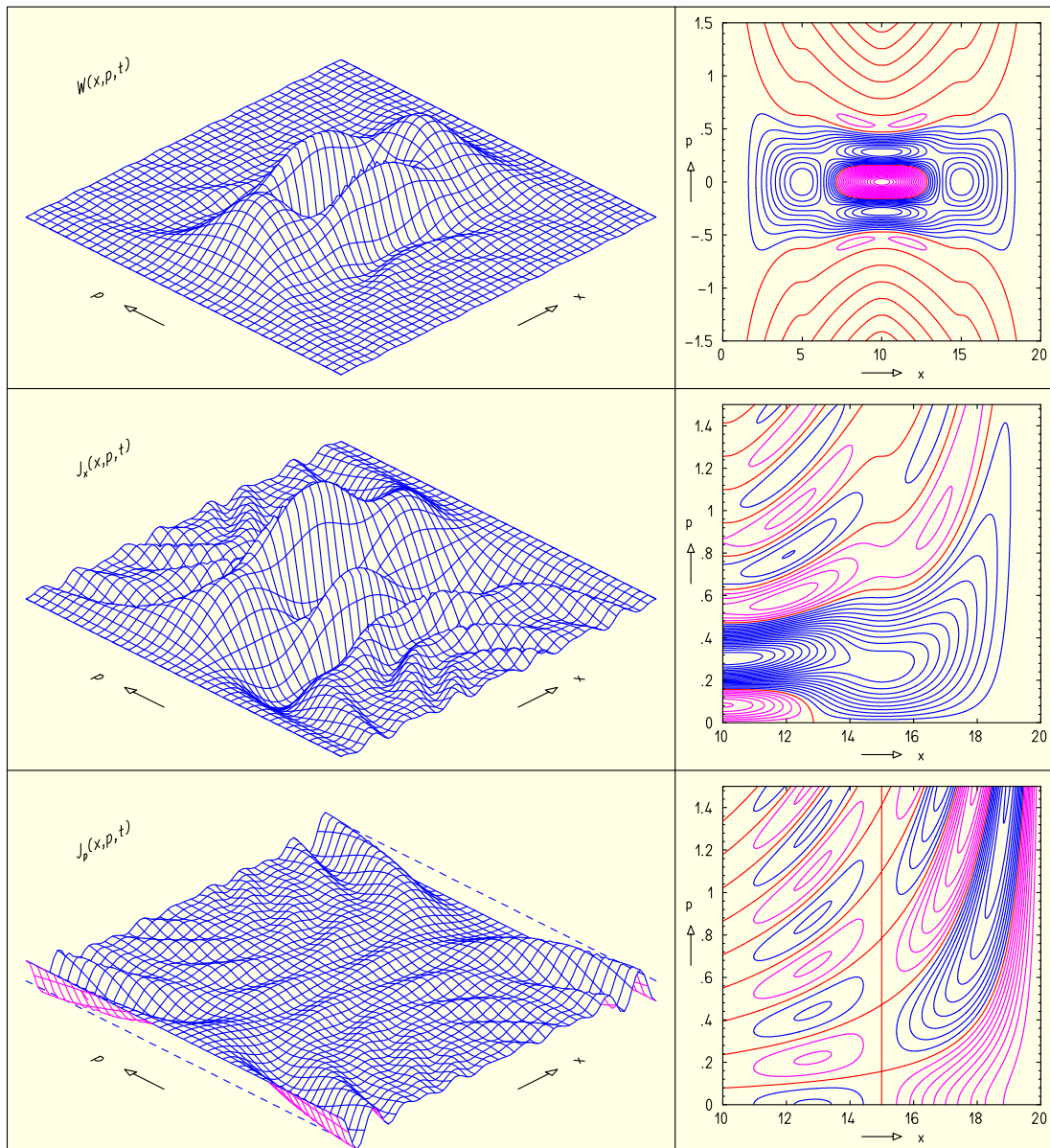


Abbildung 2.2: Wigner-Funktion des ersten angeregten Zustandes ($n = 2$) des tiefen Kastens und zugehörige Stromdichten $J_x(x, p, t)$ und $J_p(x, p, t)$; Darstellung entsprechend Bild 2.1.

mit positiven Bereichen abwechseln. Die Beträge der (Extremal-)Werte nehmen für große $|p|$ wie $1/p^2$ ab. Am Rand ($x \rightarrow 0$ oder $x \rightarrow d$) verschwindet die Funktion $\sim x^2$ bzw. $\sim (x - d)^2$. Das Verhalten der Stromdichte $J_x(x, p, t)$ erschließt sich als mit p/m multiplizierte Wigner-Funktion direkt aus dieser. Die Stromdichte $J_p(x, p, t)$ besitzt im gesamten bzgl. x zentralen Raum positive und negative Bereiche. Für festes x ist sie (harmonisch) periodisch in p (und damit

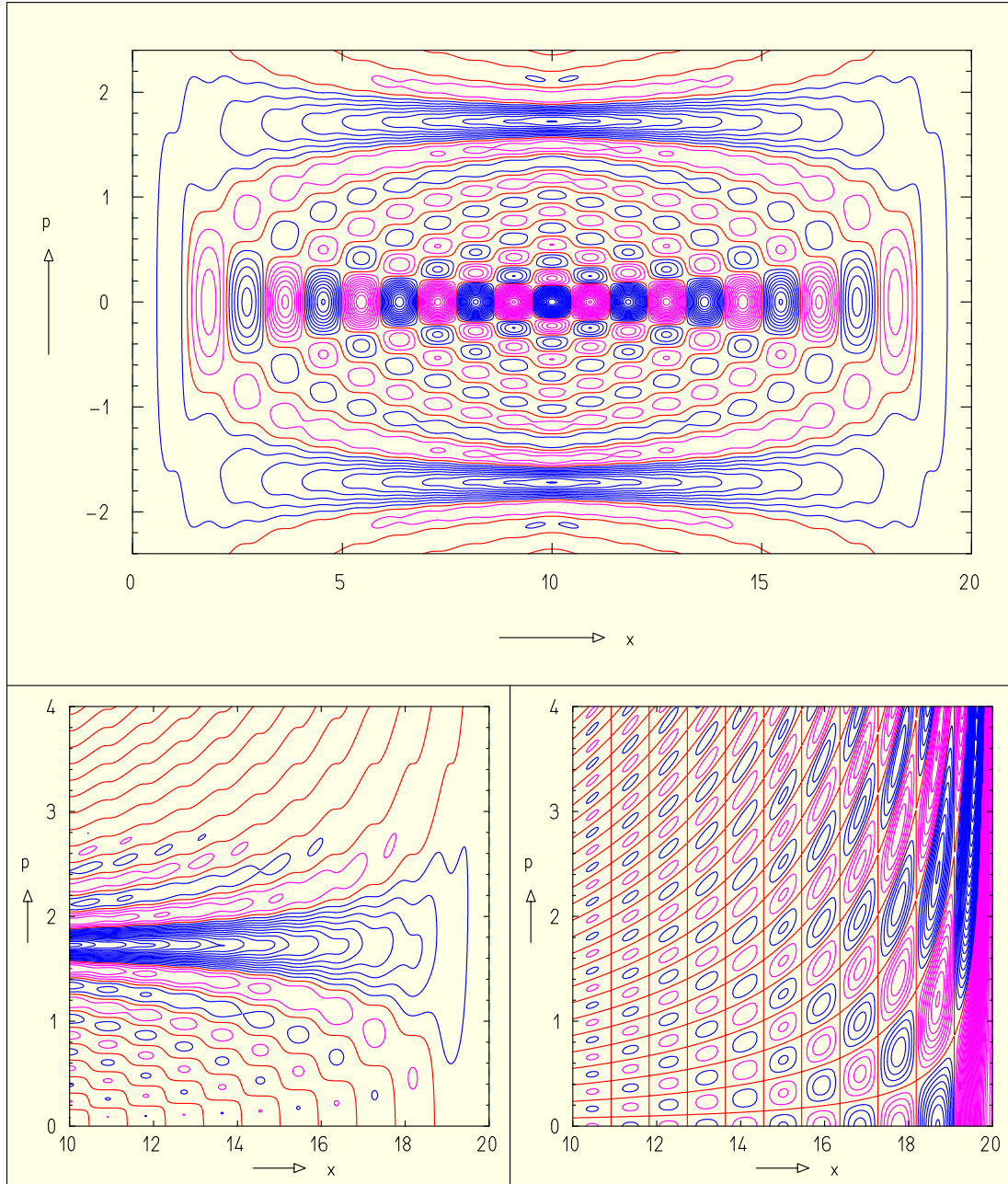


Abbildung 2.3: Wigner-Funktion (oben) des elften Zustandes ($n = 11$) des tiefen Kastens und zugehörige Stromdichten $J_x(x, p, t)$ und $J_p(x, p, t)$ (unten links bzw. rechts); Konturzeichnungen entsprechend Bild 2.1.

auch asymptotisch). An den Rändern in x strebt $J_p(x, p, t)$ gegen eine Konstante (2.49) bzw. (2.50), die für $x \rightarrow 0$ positiv und für $x \rightarrow d$ negativ ist und den Extremalwert darstellt.

In Bild 2.2 befinden sich Darstellungen dieser Größen für den ersten angeregten Zustand und in Bild 2.3 für den elften Zustand. In den Impulsintervallen $(n-1)\pi\hbar/d < |p| < (n+1)\pi\hbar/d$ ist die Wigner-Funktion positiv. Zu großen $|p|$ hin und an den Rändern in x ist das Verhalten ähnlich wie im Fall $n=1$. Im Innenbereich existieren dagegen $n-1$ konzentrische Bereiche wechselnden Vorzeichens. Dabei ist der innerste Bereich positiv für n ungerade und negativ für n gerade. Das Verhalten der Stromdichte $J_p(x, p, t)$ ist dem für $n=1$ ähnlich. Es treten neben $2(n-1)$ weiteren, zu festen x gehörenden Knotenlinien dieselben wie für $n=1$ auf. Daneben werden die Randextrema mit wachsendem n immer ausgeprägter.

2.9.4 Wellenpaket im tiefen Kasten

Hier betrachten wir die Zeitentwicklung einer Wigner-Funktion (2.40) eines quasi-gaußschen Wellenpakets im tiefen Kasten. Die Zerlegung in die Eigenzustände des Kastens erfolgt nach Anhang B. Zum Wellenpaket tragen hier unter Vernachlässigung sehr kleiner Koeffizienten 16 Eigenzustände um den 25. Zustand herum bei. Die zugehörige Impulsstromdichte (2.45) für diesen Fall wird entsprechend dargestellt.

In Bild 2.4 wird eine zeitliche Abfolge einer Wigner-Funktion eines anfänglich zentral positionierten Wellenpakets mit positivem anfänglichen Impulserwartungswert gezeigt. Das betrachtete Zeitintervall entspricht einer halben klassischen Periode dieses Erwartungswerts. Die graphische Darstellung erfolgt in Form von Konturlinien. In großer Entfernung von der Potentialwand wird das Paket durch eine kräftefreie Bewegung beschrieben (1. und 2. Teilbild). Die Funktionswerte sind (bis auf Gebiete in weiterer Entfernung vom Zentrum des Pakets) im wesentlichen nichtnegativ. Infolge der Reflexion des Wellenpakets an der harten Wand verlagert sich die Verteilung zu negativen Impulsen (3. und 4. Teilbild), wobei die Dichte hauptsächlich entlang eines schmalen Kanals mit positiven Werten der Wigner-Funktion an der Potentialwand dorthin gelangt. Durch die so zeitweise bestehenden Anteile des Wellenpakets mit verschiedenen Impulsvorzeichen ergibt sich die Entstehung einer Interferenzstruktur mit wechselnden Vorzeichen zwischen diesen Anteilen. Diese Interferenzstruktur ist vornehmlich in Impulsrichtung ausgeprägt und schließt sich direkt an den (positiven) Kanal in der Nähe der Potentialwand an. (Die Randverteilung im Ort erhält so ihre typischen Interferenzen.) Nach dem Kontakt mit der Wand bildet sich bei negativen Impulsen die quasi-gaußsche Form der Wigner-Funktion zurück (5. und 6. Teilbild). Im letzten Teilbild befindet sich das Paket im Ort wieder am Ausgangspunkt. Es hat sich jedoch entsprechend einem freien Wellenpaket verbreitert und eine

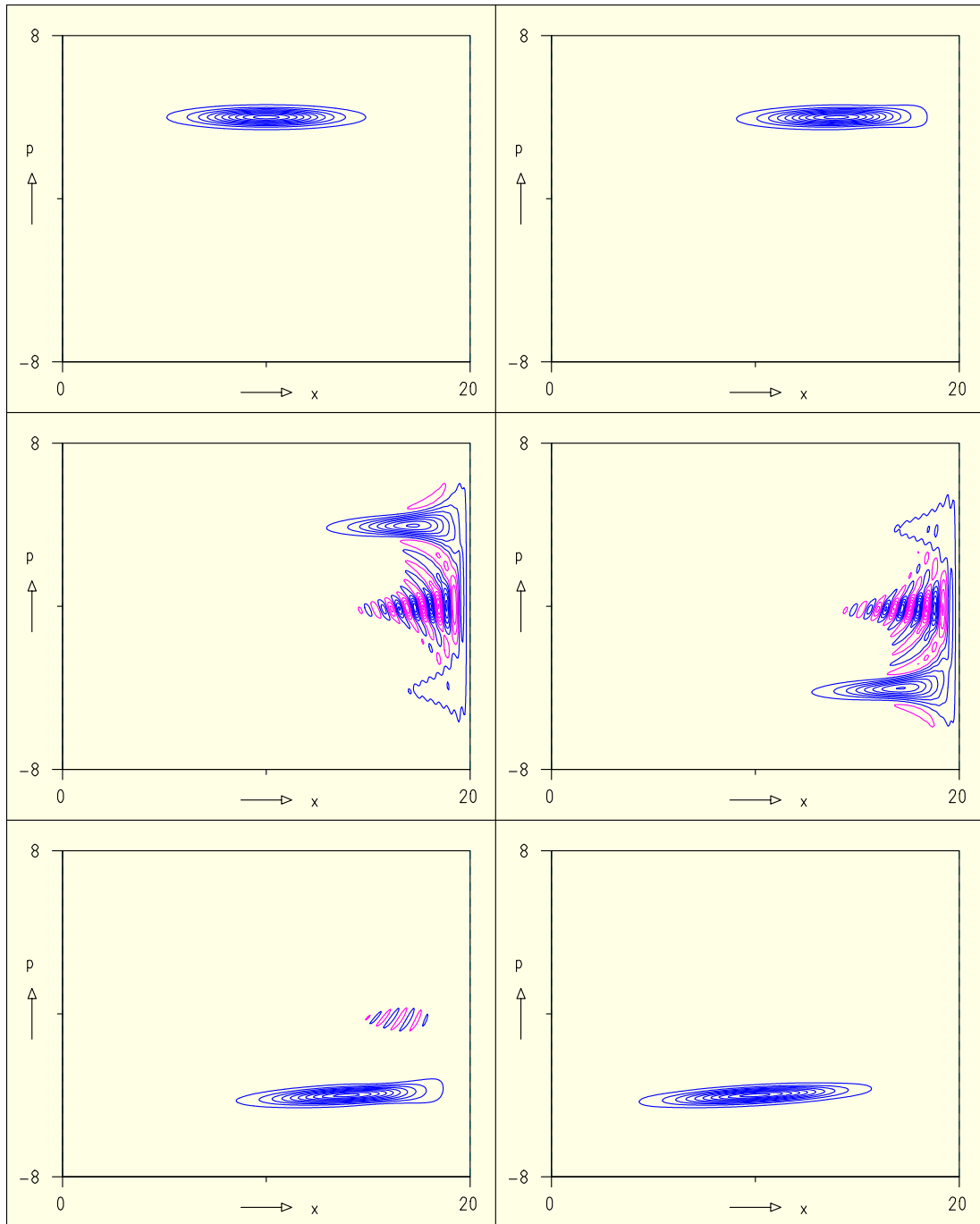


Abbildung 2.4: Zeitliche Abfolge von Höhenlinienbildern einer Wigner-Funktion eines Wellenpakets im tiefen Kasten. Das Wellenpaket ist zentral in den Kasten gesetzt und besitzt einen positiven Impulserwartungswert. (Für den Wert 0 werden keine Höhenlinien gezeigt: Die einzelnen Werte sind ungerade Vielfache eines kleinen positiven Wertes.)

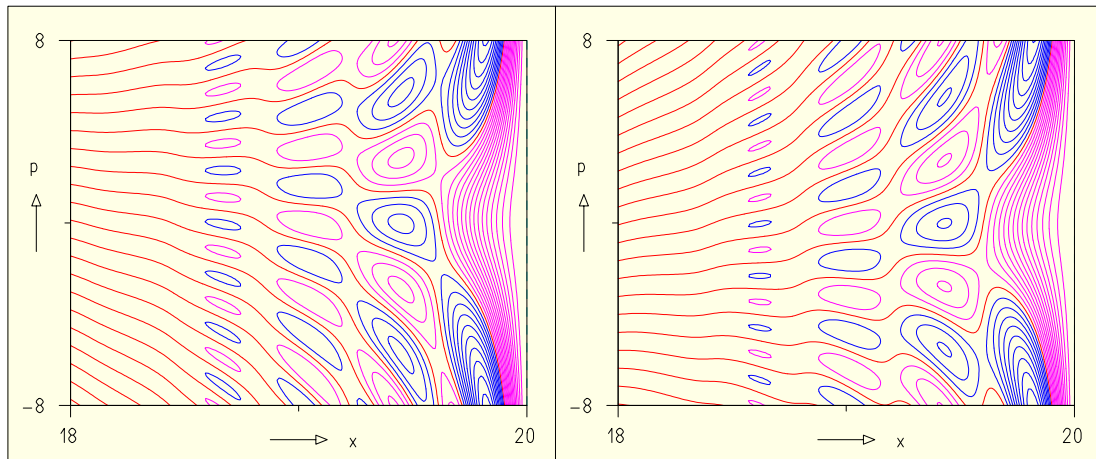


Abbildung 2.5: Impulsstromdichte des Wellenpakets aus Bild 2.4 für die mittleren beiden Zeitpunkte. Gezeigt ist jeweils ein Bereich vor der Potentialwand ($9d/10 < x < d$). Außerhalb dieses Bereichs und für die anderen Zeitpunkte aus Bild 2.4 liegen die Werte fast alle unterhalb des kleinsten nichtverschwindenden gezeichneten Wertes.

Orts-Impuls-Korrelation ausgebildet, wobei die von denselben Höhenlinien umschlossenen Flächen vor und nach der Reflexion nahezu gleich sind.

Die zu Bild 2.4 gehörende Impulsstromdichte J_p ist in Bild 2.5 gezeigt. Dabei werden nur die relevanten Bereiche gezeigt. Sie umfassen den Bereich am Rand des Potentialtopfes, an dem die Reflexion stattfindet, und auch nur die Zeitpunkte, die den Teilbildern 3 und 4 von Bild 2.4 entsprechen. Wie für die Wigner-Funktion aus Bild 2.4 sind die beiden Situationen bezüglich p beinahe gespiegelt, und der Unterschied resultiert aus der Dispersion des Wellenpakets. Die Struktur in der Nähe des Randes ist ähnlich der für die Eigenzustände (Bilder 2.1, 2.2 und 2.3). Ebenso zeigt sich in p ein asymptotisch (quasi-)oszillatorisches Verhalten, welches aus dem linearen Verhalten der Wellenfunktion am Rand resultiert.

2.9.5 Streuung an Potentialbarrieren

In diesem Abschnitt betrachten wir zunächst die Streuung eines quasi-gaußschen Wellenpakets an einer Potentialbarriere. Die gesamte Anordnung wird in einen tiefen Kasten eingebettet, so daß wie in Abschnitt 2.9.4 eine Zerlegung in eine kleine Anzahl von Eigenzuständen dieses Potentials nach Anhang B erfolgen kann. In diesem Fall tragen 73 Eigenzustände bei. Die Darstellung der Größen erfolgt entsprechend Abschnitt 2.9.4.

In Bild 2.6 ist die Wigner-Funktion eines Wellenpakets in einem Streuvorgang an einer Potentialstufe als zeitliche Abfolge mit Konturlinien dargestellt. Das Wellenpaket bewegt sich wie jenes aus Bild 2.4 anfänglich frei (1. und 2. Teilbild); es ist lediglich im Vergleich zur Breite weiter von der Potentialstufe bzw.

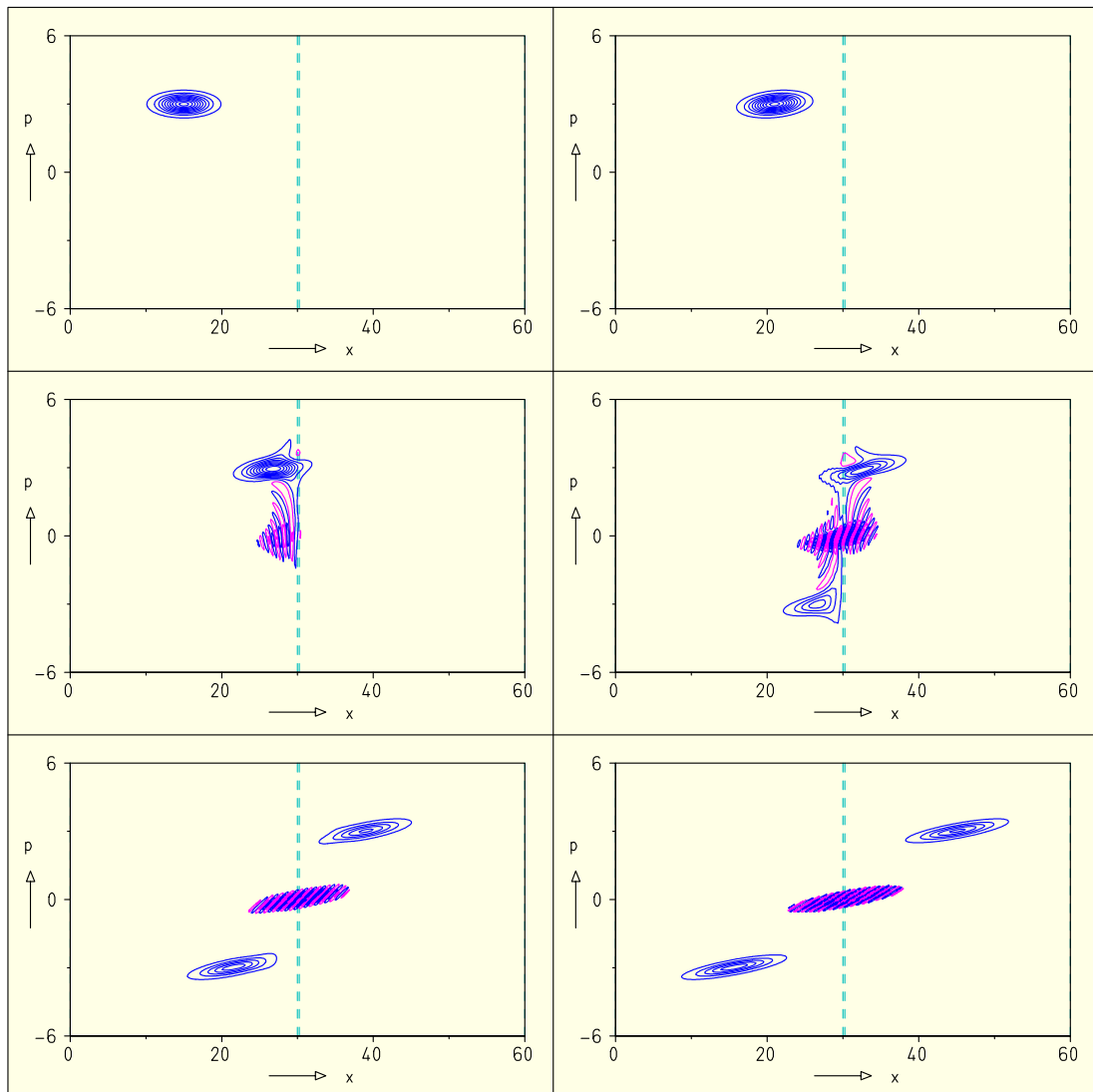


Abbildung 2.6: Zeitliche Abfolge von Höhenlinienbildern einer Wigner-Funktion eines an einer Potentialbarriere streuenden Wellenpakets mit positivem Impulserwartungswert. (Darstellung wie in Bild 2.4.)

-wand entfernt. Die Parameter sind so gewählt, daß das Paket fast ausschließlich durch Eigenfunktionen mit Eigenwerten unterhalb der Barriere zusammengesetzt werden kann ($\bar{x} = 15$, $\bar{p} = 3$, $\sigma_p = 0.25$, $\sigma_x = 2$, $V = 11$, $D = 0.25$). Beim Auftreffen auf die Barriere zeigt die Wigner-Funktion links der Barriere ein ähnliches Verhalten wie beim Auftreffen auf eine harte Wand. Das Paket durchdringt allerdings die Barriere, und die Interferenzen bilden sich auch rechts der Barriere aus. Ein Kanal mit positiven Funktionswerten bildet sich aus, der aber einerseits innerhalb der Barriere und andererseits nicht bei konstantem Ort verläuft. In der Folge kommt es zu einer Teilung des Wellenpakets; die beiden Teilwellenpakete

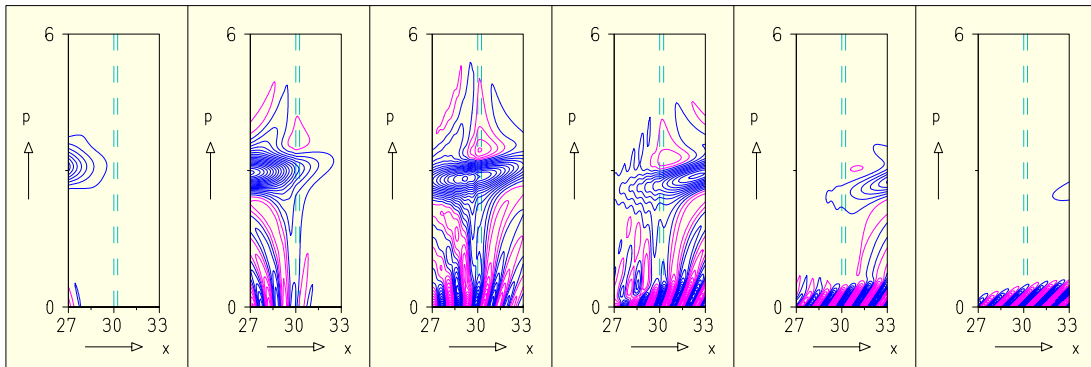


Abbildung 2.7: Vergrößerte Darstellungen der Situation aus Bild 2.6: Der erste dargestellte Zeitpunkt liegt zwischen dem zweiten und dritten Teilbild von 2.6 und der letzte entspricht dem dortigen fünften Teilbild. Dabei wurden die Werte zu den Höhenlinien gegenüber Bild 2.6 halbiert.

besitzen angenähert noch eine gaußsche Form und sind wie freie Wellenpakete bezüglich x und p korreliert. Zusätzlich verbleibt in der Mitte zwischen den Teilwellenpaketen der Interferenzterm bestehen, der die Korrelation zwischen diesen Teilen beinhaltet. Dessen x - und p -Randverteilungen verschwinden zu großen Zeiten nahezu. Entsprechend liefert der Interferenzterm keinen Beitrag zur x -Randverteilung rechts der Potentialbarriere.

Der Tunnelvorgang für quasi-gaußsche Pakete zeigt ein charakteristisches Verhalten. In Bild 2.7 ist die Situation aus Bild 2.6 in der Nähe der Barriere (räumlich und zeitlich) mit höherer Auflösung dargestellt. Neben der signifikanten Interferenzstruktur zwischen Anteilen mit positivem Impuls (einfallend, transmittiert) und negativem Impuls (reflektiert) bilden sich oberhalb des Impulserwartungswertes alternierende Strukturen aus. Anfänglich während des Auftreffens auf die Barriere tritt vor dieser ein negativer Bereich hervor. Während des Durchgangs durch die Barriere verliert dieser an Deutlichkeit. Ein entsprechender Bereich bildet sich zeitweise während des Verlassens des transmittierten Teils auf der gegenüberliegenden Seite der Barriere. An der Barriere entsteht beim Durchgang des Pakets ein signifikanter negativer Bereich in Tropfenform, der seine Lage bis auf die seines Minimums kaum ändert. Die deutlichste Ausprägung erfährt er wenn das (lokale) Maximum der Verteilung die Potentialbarriere erreicht. Das Maximum selbst passiert die Barriere bei einem etwas geringeren Impuls als dem anfänglichen Erwartungswert aufgrund der Verringerung der kinetischen Energie.

Bild 2.8 zeigt die zugehörige Impulsstromdichte. Wie für den Fall des Wellenpakets im tiefen Kasten aus Abschnitt 2.9.4 werden nur die relevanten Ausschnitte und Zeitpunkte dargestellt. Die Zeiten entsprechen den mittleren beiden aus Bild 2.6 bzw. dem zweiten und vierten Teilbild von 2.7. Links der Barriere bestehen im gezeigten Impulsbereich deutliche Ähnlichkeiten zu der Situation der Reflexion an einer harten Wand aus Bild 2.5. Zu größeren Beträgen des Impulses hin

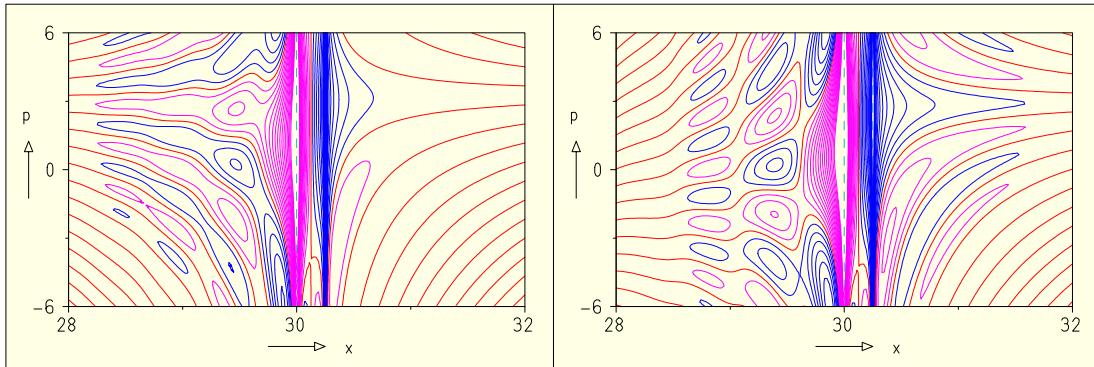


Abbildung 2.8: Impulsstromdichte der Wigner-Funktion des Wellenpakets aus Bild 2.6 als Höhenlinienbild für die beiden mittleren Zeitpunkte. Gezeigt ist jeweils ein Ausschnitt in der Nähe des Potentialwalls. Wie in Bild 2.5 sind die Werte für die anderen Zeitpunkte fast überall kleiner als der kleinste dargestellte Wert. Ausnahmen bilden hier wegen der Singularitäten vor allem die Bereiche in unmittelbarer Nähe der Potentialstufen. Durch die begrenzte Zahl der dargestellten Werte bleiben Bereiche an den Stufen frei.

wird die Impulsstromdichte kleiner, und an den Stufen ist J_p logarithmisch singular, vgl. Abschnitt 2.9.1. An steigenden Flanken des Potentials ist J_p negativ, an fallenden positiv. Da der transmittierte Teil des Pakets nur einen Teil des Gesamtpakets (hier etwa die Hälfte) umfaßt, ist der singuläre Term an der fallenden Potentialflanke weniger stark ausgeprägt.

Ein vergleichbarer Fall ist der eines Wellenpakets, welches auf einen tiefen schmalen Potentialtopf trifft. Die Behandlung dieser Konfiguration erfolgt wie im Fall des repulsiven Potentials, wobei hier ähnlich viele (72) Eigenzustände beitragen.

Die Wigner-Funktion für die Streuung eines Wellenpakets an einem Potentialtopf ist in Bild 2.9 gezeigt. Die Parameter der Anordnung sind bis auf den Wert des Potentials ($V = -25$) unverändert; letzterer wurde so gewählt, daß die Transmission etwa von gleicher Größe wie im vorhergehenden Fall ist. Das Verhalten der Wigner-Funktion zeigt deutliche Ähnlichkeiten zum repulsiven Potential. Dies betrifft nahezu die gesamte Zeitentwicklung, insbesondere die Zeiten vor und nach der Streuung, aber auch die Herausbildung des Interferenzterms.

Signifikante Unterschiede ergeben sich bei den Einzelheiten während der Streuung. Bild 2.10 zeigt die Situation in der Nähe des Streupotentials aus Bild 2.9 analog zu Bild 2.7 mit höherer Auflösung. Dabei erscheinen die verschiedenen Interferenzbereiche außerhalb des zentralen Maximums gegenüber dem Fall des repulsiven Potentials mit umgekehrten Vorzeichen. Dies betrifft einerseits die alternierenden Strukturen oberhalb des Impulserwartungswertes wie auch die Interferenzstruktur zu kleineren Impulsen hin, in die sich nun am Potentialtopf ein signifikanter negativer Bereich mit umgekehrter Tropfenform eingliedert. Ober-

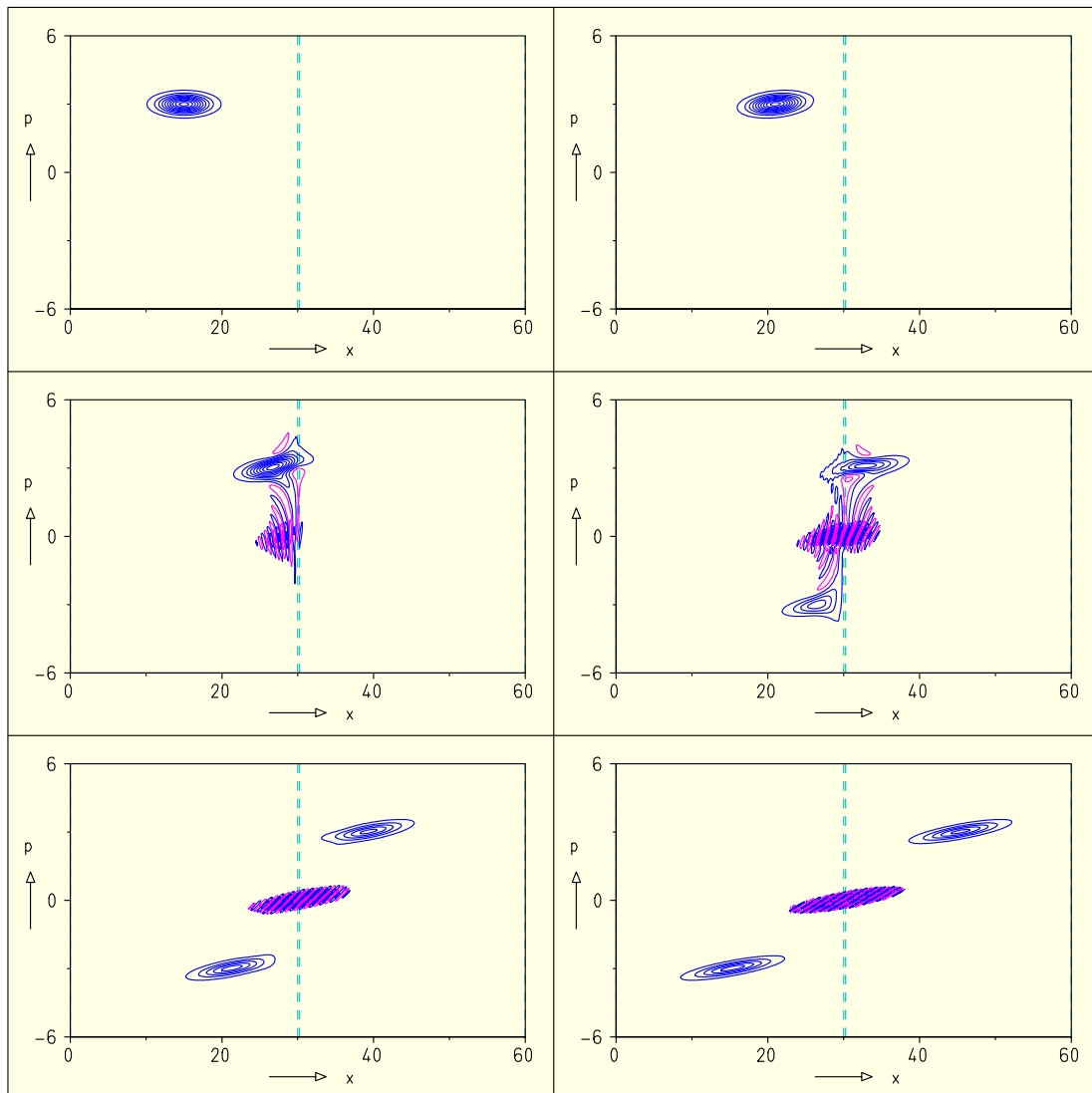


Abbildung 2.9: Zeitliche Abfolge von Höhenlinienbildern einer Wigner-Funktion eines an einem schmalen Potentialtopf streuenden Wellenpakets mit positivem Impulserwartungswert. (Darstellung wie in Bild 2.6.)

halb des Impulserwartungswertes bleibt die Wigner-Funktion am Potentialtopf positiv. Ein Kanal mit positiven Funktionswerten zwischen einlaufendem bzw. transmittiertem und reflektiertem Teil wird zeitweise von den vor und hinter dem tropfenförmigen negativen Bereich befindlichen Interferenzstrukturen gebildet. Aufgrund des attraktiven Potentials passiert das Maximum den Streubereich bei einem etwas höheren Impuls als dem anfänglichen Erwartungswert.

In Bild 2.11 ist die zugehörige Impulsstromdichte gezeigt. Dabei werden wie in Bild 2.8 nur die relevanten Ausschnitte und Zeitpunkte dargestellt. Diese entsprechen hier analog den mittleren beiden Teilbildern von 2.9 bzw. dem zweiten und

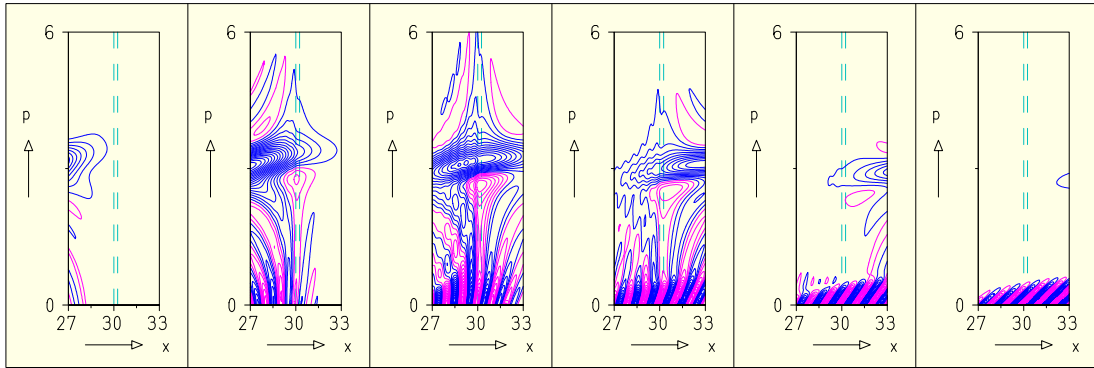


Abbildung 2.10: Vergrößerte Darstellungen der Situation aus Bild 2.9 entsprechend Bild 2.7.

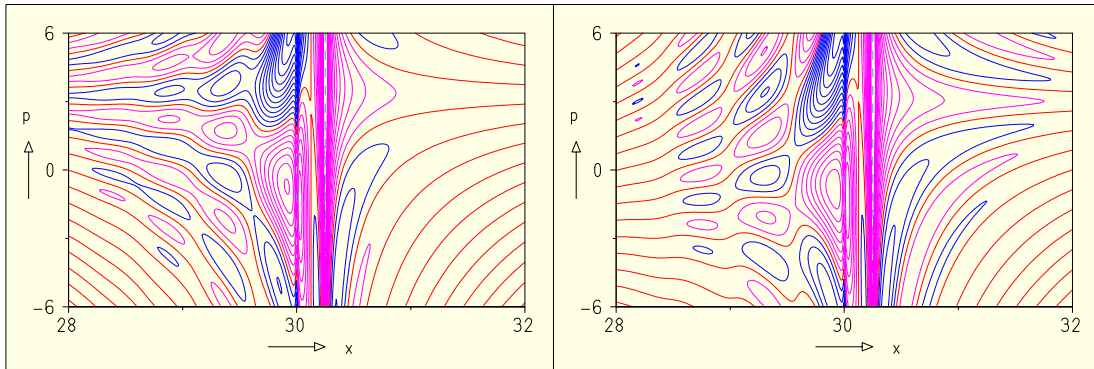


Abbildung 2.11: Impulsstromdichte der Wigner-Funktion des Wellenpakets aus Bild 2.9 als Höhenlinienbild für die beiden mittleren Zeitpunkte wie in Bild 2.8.

vierten Teilbild von 2.10. In einiger Entfernung vom Streupotential ist das Aussehen ähnlich zu Bild 2.8. Die logarithmischen Singularitäten besitzen gegenüber denen für die repulsive Barriere umgekehrte Vorzeichen. Darüber hinaus sind die positiven Singularitäten an der linken Potentialflanke im zentralen Impulsbereich von negativen Werten umgeben und daher stark unterdrückt.

Wir betrachten nun die Resonanzstreuung eines Wellenpakets an einer repulsiven Doppelbarriere. Dabei werden die Parameter des Wellenpakets ($\bar{x} = 15$, $\bar{p} = 2.7$, $\sigma_p = 0.25$, $\sigma_x = 2$) und die des Potentials ($V = 20$ für $30 < x < 30.2$ und $31 < x < 31.2$) so gewählt, daß (fast) ausschließlich die erste Resonanz des Systems angeregt und ein signifikanter Teil des Wellenpakets transmittiert wird. Die Wigner-Funktion für die beschriebene Situation wird in Bild 2.12 mit Höhenlinien dargestellt. Es bestehen bis zum Passieren der Doppelbarriere Ähnlichkeiten mit dem Tunnelprozeß an der Einzelbarriere, vgl. Bild 2.6. Die erste Resonanz zwischen den Barrieren wird angeregt (Teilbild 4 und 5). Die Wigner-Funktion besitzt dort außerhalb der zentralen Interferenzen hauptsächlich positive Werte, die in Teilbild 6 bereits kleiner als die dargestellten Höhenlinien sind. Der reflek-

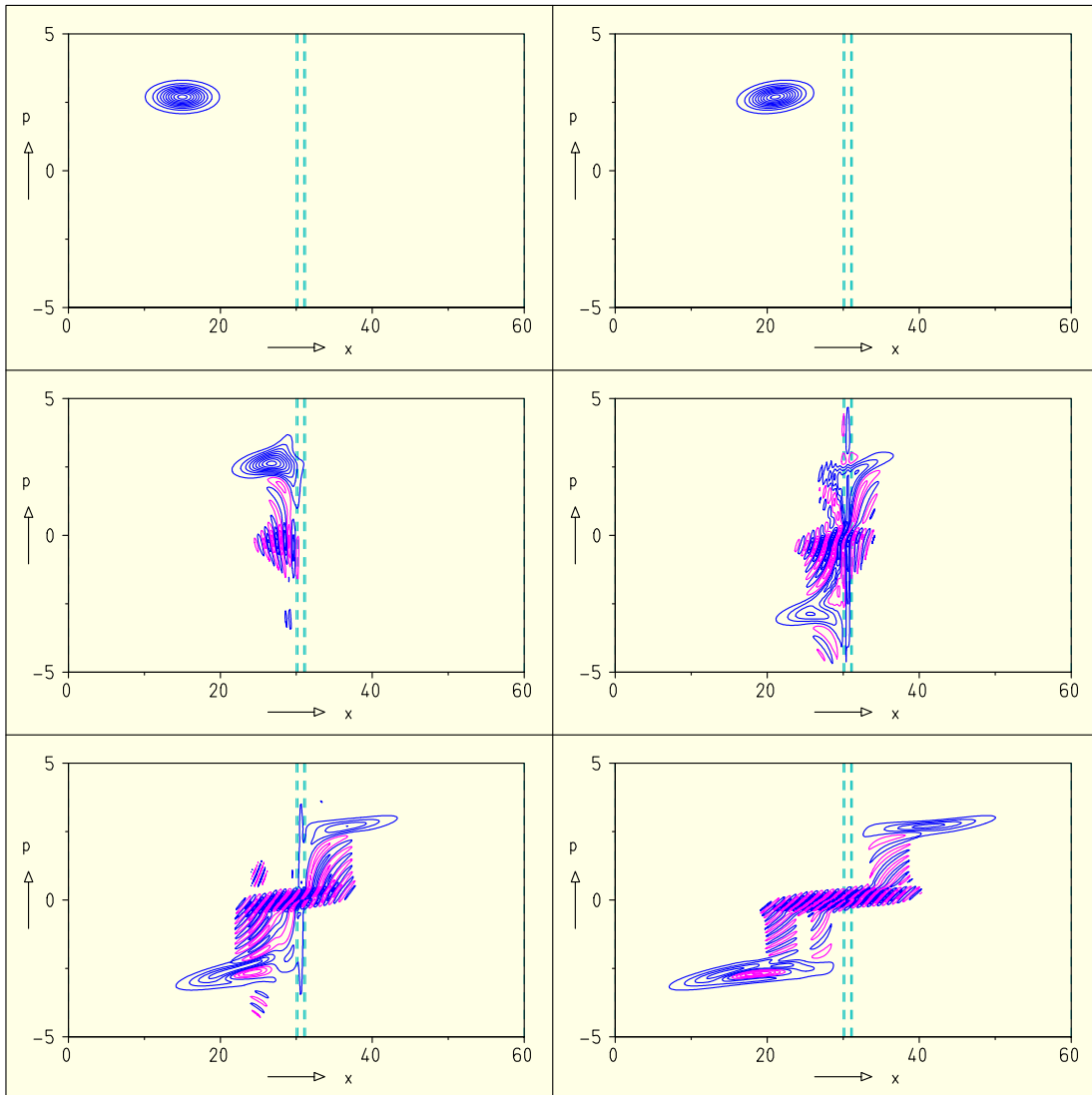


Abbildung 2.12: Zeitliche Abfolge von Höhenlinienbildern einer Wigner-Funktion eines an einer Doppelbarriere streuenden Wellenpakets mit positivem Impulserwartungswert. (Darstellung wie in Bild 2.6.)

tierte Teil besteht im Ortsraum aus zwei Anteilen; kleine Dichten befinden sich am Zentrum des negativen Bereichs unterhalb der reflektierten Teile. In Teilbild 6 sind neben den Interferenzen zwischen transmittiertem und reflektiertem Teil auch solche zwischen dem innerhalb der Doppelbarriere befindlichen resonanten Rest, dessen wesentliche Ausdehnung, wie in Teilbild 5 zu erkennen, im Impuls etwa durch die Lage des Wellenpakets gegeben ist, und den vorher genannten Teilen zu beobachten. Wegen der Lage bei arithmetischen Mitteln in Ort und Impuls erklärt sich Form und Lage dieser Interferenzstrukturen, und wegen der

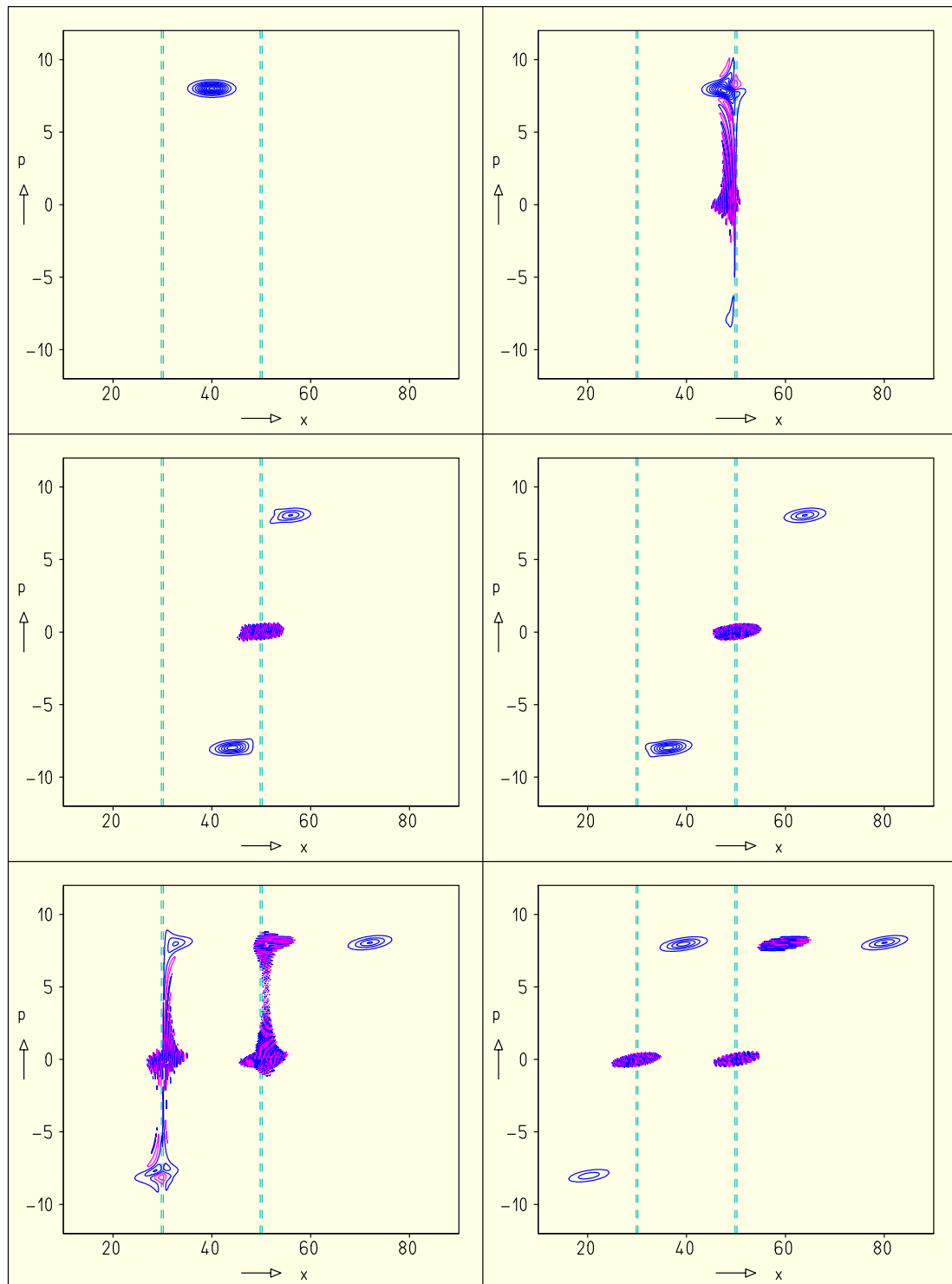


Abbildung 2.13: Zeitliche Abfolge von Höhenlinienbildern einer Wigner-Funktion eines anfänglich in einer Doppelbarriere befindlichen Wellenpakets. (Darstellung wie in Bild 2.4.)

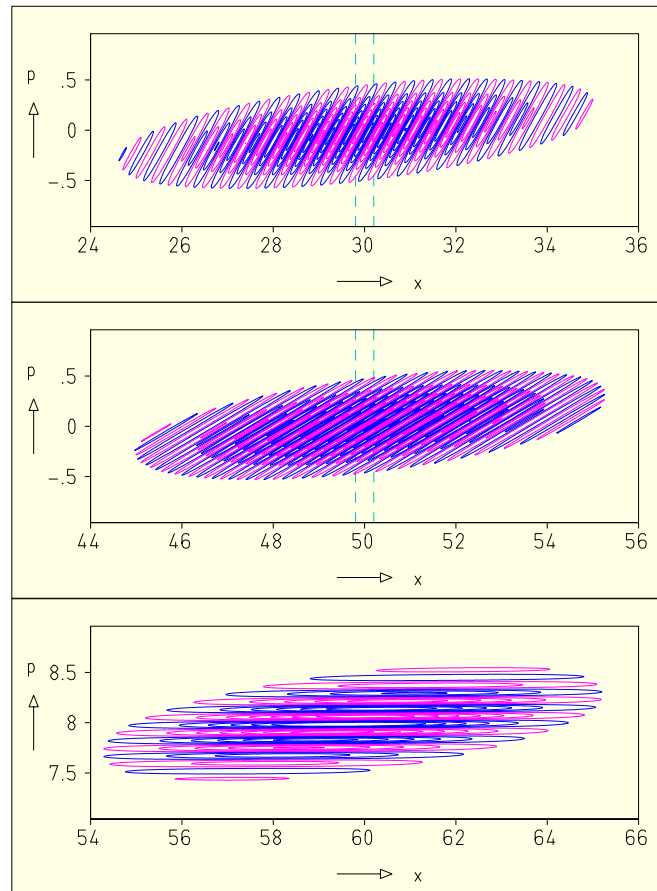


Abbildung 2.14: Interferenzterme von Teilbild 6 aus Bild 2.13. Dabei entsprechen die Bilder von oben nach unten den Termen aus Bild 2.13 von links nach rechts.

Doppelstruktur des reflektierten Teils erscheint die zugehörige Interferenz mit dem resonanten Rest geteilt.

Als weiteren Fall untersuchen wir ein Wellenpaket, welches sich anfänglich innerhalb einer symmetrischen Doppelbarriere befindet. Diese Anordnung ist ebenfalls in einen tiefen Kasten eingebettet.

In Bild 2.13 wird eine solche Situation dargestellt als zeitliche Entwicklung in Form von Konturlinien. Die Energie des Impulserwartungswertes befindet sich in diesem Fall oberhalb der Potentialbarriere ($\bar{x} = 40$, $\bar{p} = 8$, $\sigma_p = 0.25$, $\sigma_x = 2$, $V = 30$, $D = 0.4$). Das Verhalten der Wigner-Funktion beim Auftreffen des Wellenpakets auf die rechte Barriere (Teilbild 2) ist vergleichbar dem bei der Einzelbarriere aus Bild 2.6, auch bei geänderten Parametern. Nach der Streuung ist der transmittierte Teil des Wellenpakets leicht verformt (Teilbilder 3,4). Der Streuvorgang wiederholt sich qualitativ, wenn der reflektierte Teil auf die linke Barriere trifft (Teilbild 5). Es treten nun neben dem ersten Interferenzterm der ersten Streuung weitere zwischen allen Teilen des Wellenpakets auf. Die

langgestreckte, örtlich mittlere Struktur in Teilbild 5 entsteht insbesondere aus der Korrelation des rechten, transmittierten Teils mit dem gerade an der linken Barriere streuenden Teil. Nach der Aufspaltung des Wellenpakets an der linken Barriere existieren drei Interferenzterme (Teilbild 6), vgl. Abschnitt 2.7, jeweils in der Mitte zwischen zwei Teilwellenpaketen. Während jedes Tunneldurchgangs bildet sich deutlich sichtbar je ein tropfenförmiger negativer Bereich wie in Bild 2.7 näher gezeigt aus.

Die oben erwähnten Interferenzterme aus Teilbild 6 von Bild 2.13 sind in Bild 2.14 einzeln dargestellt. Wie man erkennt, sind die Interferenzen jeweils in Richtung der Verbindungslinien zwischen den Teilwellenpaketen ausgerichtet. Dies ist notwendigerweise so, denn anderenfalls könnte man mit langgestreckten, korrelierte Zustände beschreibenden Gauß-Verteilungen z. B. negative Interferenzen herausprojizieren, was aber wegen (2.22) nicht möglich ist.

2.9.6 Korrelationen in Wigner-Verteilungen

Wie in Abschnitt 2.7 beschrieben und in Abschnitt 2.9.5 an Beispielen gezeigt, existiert zwischen zwei Teilwellenpaketen im Phasenraum jeweils eine Interferenzstruktur, welche die Korrelation zwischen den Teilwellenpaketen beschreibt. Dieses ist eine universelle Eigenschaft der Wigner-Funktion. Anhand der Eigenzustände zweier räumlich separierter tiefer Potentialkästen werden deren Korrelationen untersucht.

Mit Bezeichnungen aus Abschnitt 2.9.3 gilt für die Wellenfunktion eines Systems aus zwei Potentialkästen der Breite d im Abstand D

$$\varphi_{E_n}^{(\sigma)}(x) = \frac{1}{2i\sqrt{d}} \times \begin{cases} \varphi_{E_n,1}^{(\sigma)} = 0 & , \quad x \leq 0 = x_1 \\ \varphi_{E_n,2}^{(\sigma)} = e^{ik_n x} - e^{-ik_n x} & , \quad 0 < x \leq d = x_2 \\ \varphi_{E_n,3}^{(\sigma)} = 0 & , \quad d < x \leq d + D = x_3 \\ \varphi_{E_n,4}^{(\sigma)} = \sigma(-1)^{n-1}(e^{ik_n(x-x_3)} - e^{-ik_n(x-x_3)}) & , \quad d + D < x \leq 2d + D = x_4 \\ \varphi_{E_n,5}^{(\sigma)} = 0 & , \quad x \geq 2d + D \end{cases} ,$$

$$\psi_J(x, t) = \varphi_{E_n,J}^{(\sigma)}(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad , \quad \sigma = \pm 1 \quad .$$

Das Vorzeichen σ bestimmt die Parität des Zustandes (bzgl. des Symmetriepunktes $d + D/2$). Die nichtverschwindenden Koeffizienten in der Darstellung (2.34) lauten

$$\alpha_n^{(2)} = \frac{1}{2i\sqrt{d}} = -\beta_n^{(2)} \quad , \quad \alpha_n^{(4)} = \frac{\sigma(-1)^{n-1}}{2i\sqrt{d}} = -\beta_n^{(4)} \quad .$$

Bezeichne $W_{\text{sw}}(x, p, t)$ die Wigner-Funktion (2.52) eines Eigenzustandes des tiefen Kastens. Dann erhält man nach (2.40) mit den relevanten Integralgrenzen

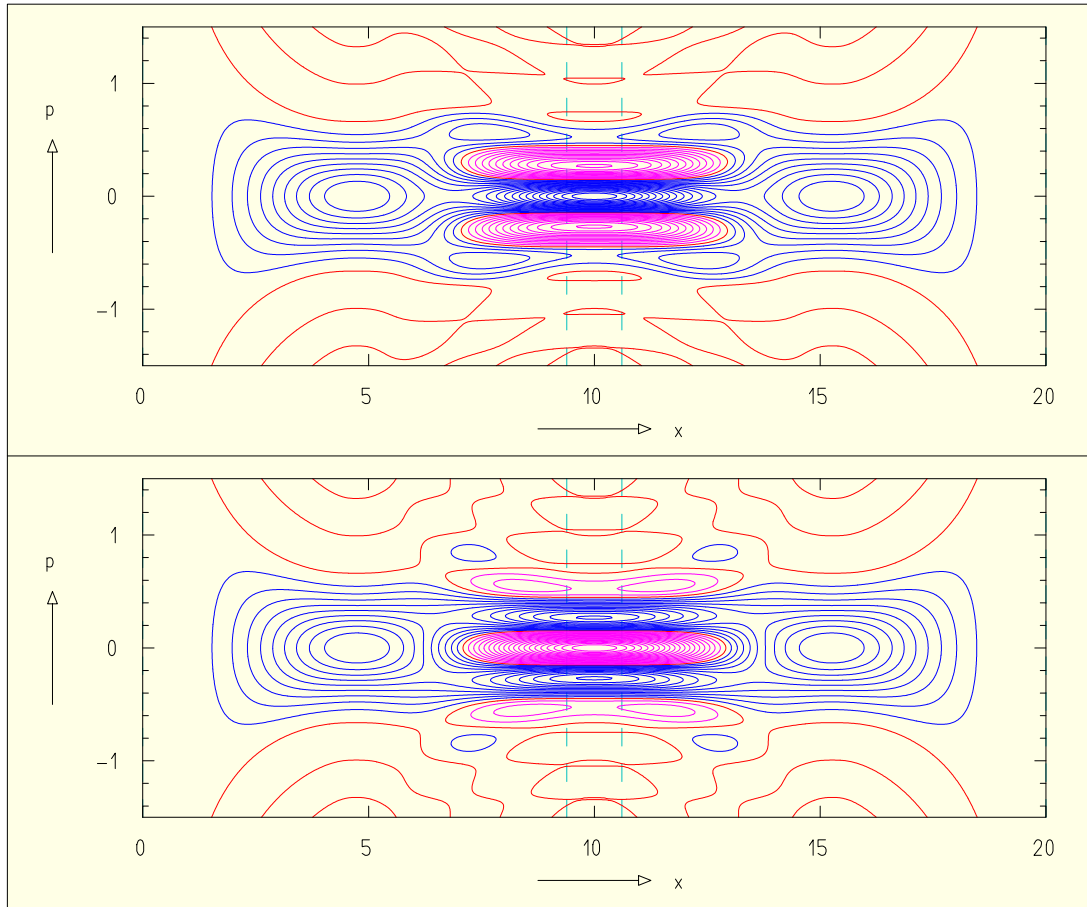


Abbildung 2.15: Wigner-Funktionen der beiden niedrigsten Eigenzustände (oben: $n_{\text{ges}} = 1$, unten: $n_{\text{ges}} = 2$) eines symmetrisch geteilten tiefen Potentialtopfes. Wegen der geringen Transparenz der Barriere ($V = 50$) sind die beiden Einzeltöpfe bei niedrigen Energien fast vollständig separiert.

$$\begin{aligned}
 x_a(x, 2, 2) &= |2x - d| - d = -x_b(x, 2, 2) \quad , \\
 x_a(x, 4, 4) &= |2x - (3d + 2D)| - d = -x_b(x, 4, 4) \quad , \\
 x_a(x, 2, 4) &= |2x - (2d + D)| - (2d + D) = -x_b(x, 4, 2) \quad , \\
 x_a(x, 4, 2) &= D + |2x - (2d + D)| = -x_b(x, 2, 4)
 \end{aligned}$$

den Ausdruck

$$\begin{aligned}
 W(x, p, t) &= \frac{1}{2}W_{\text{sw}}(x, p, t) + \frac{1}{2}W_{\text{sw}}(x - (d + D), p, t) \\
 &\quad - \sigma \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{1}{d} \left[\Theta\left(x - \frac{d}{2} - \frac{D}{2}\right) - \Theta\left(x - \frac{3d}{2} - \frac{D}{2}\right) \right] \\
 &\quad \times \left[\frac{1}{\hbar} \sin\left(\left(\frac{p}{\hbar} - \frac{n\pi}{d}\right)(d - |2x - (2d + D)|)\right) \cos\left(\left(\frac{p}{\hbar} - \frac{n\pi}{d}\right)(d + D) + \frac{n\pi}{d}D\right) \right]
 \end{aligned}$$

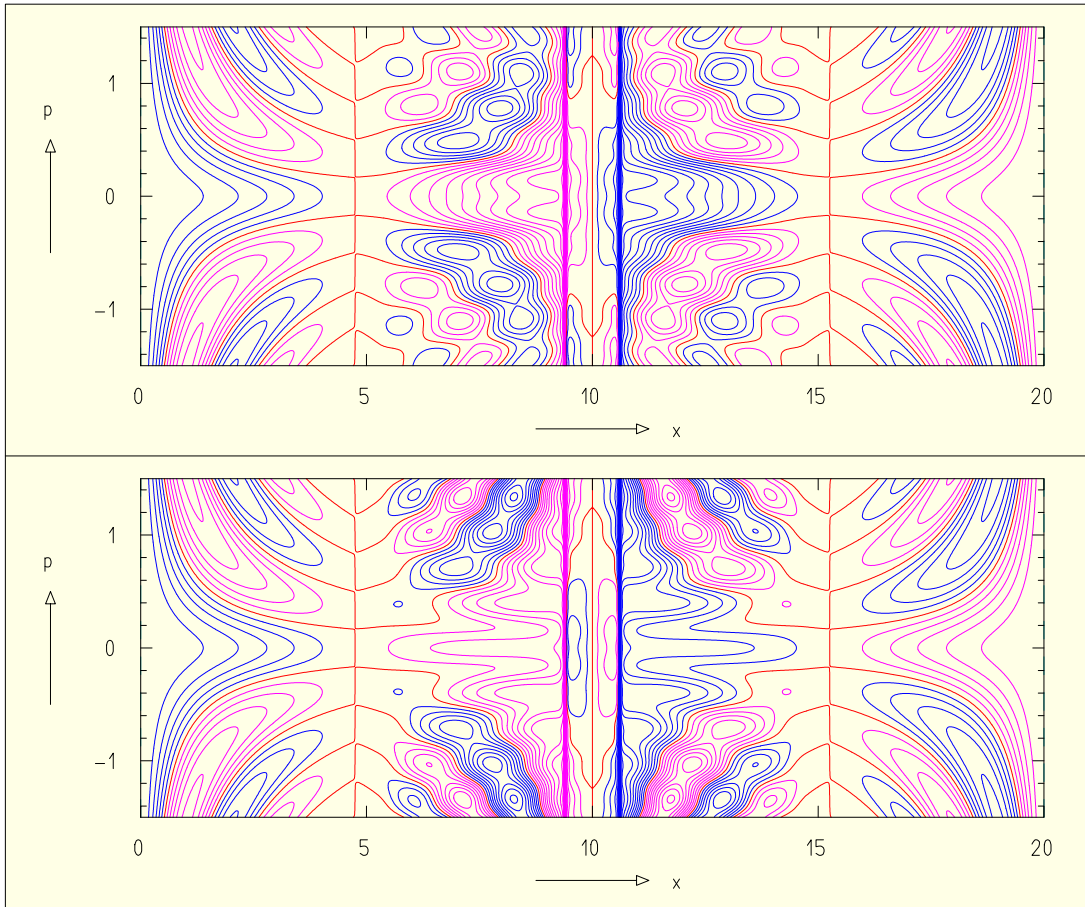


Abbildung 2.16: Impulsstromdichten zu den Wigner-Funktionen aus Bild 2.15.

$$\begin{aligned}
& -\frac{2}{\hbar} \cos\left(\frac{n\pi}{d}(2x-d)\right) \cos\left(\frac{p}{\hbar}(d+D)\right) \sin\left(\frac{p}{\hbar}(d-|2x-(2d+D)|)\right) \\
& + \frac{1}{\frac{p}{\hbar} + \frac{n\pi}{d}} \sin\left(\left(\frac{p}{\hbar} + \frac{n\pi}{d}\right)(d-|2x-(2d+D)|)\right) \cos\left(\left(\frac{p}{\hbar} + \frac{n\pi}{d}\right)(d+D) - \frac{n\pi}{d}D\right)
\end{aligned}$$

für die gesamte Wigner-Funktion. Mit $J_{p,\text{sw}}(x, p, t)$ werde entsprechend die Impulsstromdichte (2.53) eines Eigenzustands des tiefen Kastens bezeichnet. Damit gilt nach (2.45)

$$\begin{aligned}
J_p(x, p, t) &= \frac{1}{2} J_{p,\text{sw}}(x, p, t) + \frac{1}{2} J_{p,\text{sw}}(x - (d+D), p, t) \\
&+ \frac{\sigma(-1)^{n-1}}{2\pi\hbar} \left[\Theta\left(x - \frac{d}{2} - \frac{D}{2}\right) - \Theta\left(x - \frac{3d}{2} - \frac{D}{2}\right) \right] \frac{\hbar^2 2n\pi}{m d^2} \sin\left(\frac{n\pi}{d}(2x - (d+D))\right) \\
&\times \left(\frac{\cos\left(\frac{p}{\hbar}(2d+D - |2x - (2d+D)|)\right)}{2d+D - |2x - (2d+D)|} - \frac{\cos\left(\frac{p}{\hbar}(|2x - (2d+D)| + D)\right)}{|2x - (2d+D)| + D} \right)
\end{aligned}$$

für die gesamte Impulsstromdichte.

Die beschriebene Situation wird in Bild 2.15 näherungsweise dargestellt. Anstelle einer unendlich hohen Potentialwand wird eine Barriere endlicher Höhe ($V = 50$) verwendet. Diese führt bei niedrigen Energien bereits zu fast vollständiger Separation: Die Wellenfunktionen innerhalb der Potentialbarriere sind stark unterdrückt. Die zugehörigen Wigner-Funktionen hingegen verschwinden wegen des Interferenzterms nicht innerhalb der Barriere, vielmehr haben die Absolutwerte dort vergleichbare Werte mit denen außerhalb der Barriere oder übersteigen diese sogar. Die Interferenzen verbinden die Wigner-Funktionen der Einzeltöpfe über die Barriere hinweg. Wie aus der angegebenen Form für W und den Abbildungen ersichtlich geht der Term für $\sigma = \pm 1$ mit diesem Vorzeichen ein. Bild 2.16 zeigt die zugehörigen Impulsstromdichten.

Die Verbindung der Potentialtöpfe in der Wigner-Funktion über die Barriere hinweg existiert in dieser Anordnung für $D < d$. Im Fall größerer Abstände D besteht eine räumliche Trennung des Interferenzterms von den einzelnen Teilen der Wigner-Funktion.

Interferenzen, wie sie hier betrachtet wurden, sind allerdings nur dann relevant, wenn (räumlich) getrennte Teile eines Wellenpakets existieren. Für (weitgehend) getrennte Potentialtöpfe müssen Eigenfunktionen existieren, die in den einzelnen Raumbereichen jeweils signifikante Beiträge haben bzw. die Energieeigenwerte der einzelnen Töpfe müssen aufeinander abgestimmt sein.

2.10 Definition von Trajektorien (Flußlinien)

Mit den Strömen J_x (2.30) und J_p (2.31), (2.32) oder speziell (2.45) der Wigner-Verteilung betrachten wir entsprechend (2.5) bzw. (2.9) die zugehörigen Geschwindigkeiten, welche die Bewegungsgleichungen im Phasenraum definieren,

$$\dot{x} = v_x(x, p, t) = \frac{p}{m} \quad , \quad \dot{p} = v_p(x, p, t) = \frac{J_p(x, p, t)}{W(x, p, t)} \quad . \quad (2.54)$$

Eine allgemeine Verteilung ist bereits selbst anfänglich indefinit oder kann im zeitlichen Verlauf indefinit werden, vgl. Abschnitt 2.7. Die möglichen Nullstellen (Nulllinien) von $J_p(x, p, t)$ stimmen dabei i. a. nicht mit denen der Funktion $W(x, p, t)$ überein. Bleibt z. B. eine Trajektorie in einem Bereich mit $W > 0$, in dem diese Bedingung auch anfänglich galt, so können die Differentialgleichungen direkt (numerisch) integriert werden.

Wir betrachten nun eine Nulllinie von $W(x, p, t)$, die zuerst in der einfachen Form $p = p_0$ approximiert wird. In deren Nähe setzen wir den Vorfaktor zu einer Konstante, so daß wir dafür die vereinfachten Bewegungsgleichungen

$$\dot{x} = \frac{p}{m} \quad , \quad \dot{p} = \frac{\alpha}{p - p_n}$$

erhalten. Die Lösung dieser Gleichungen lautet

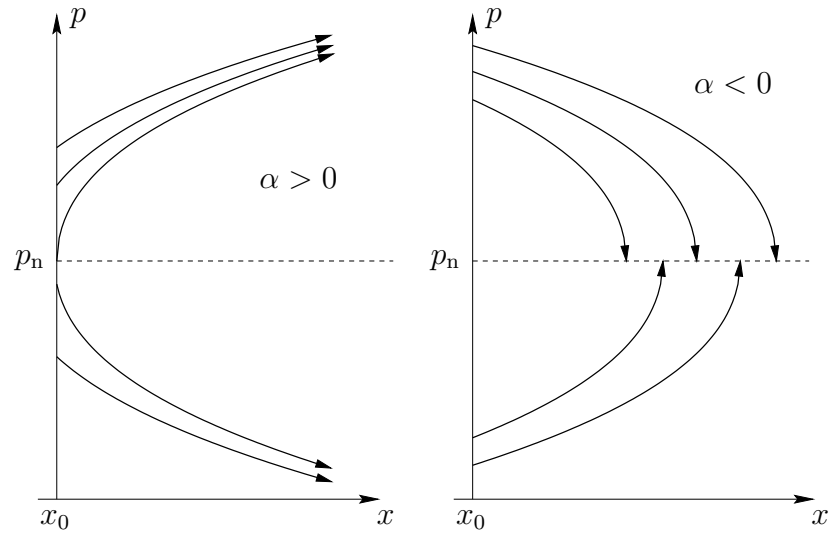


Abbildung 2.17: Trajektorien in der Nähe einer Singularität p_n für den repulsiven ($\alpha > 0$, links) und attraktiven Fall ($\alpha < 0$, rechts). Die Trajektorien beginnen jeweils am Punkt x_0 , aber bei verschiedenen Impulsen.

$$p = p_n + \text{sign}(p_0 - p_n) \sqrt{(p_0 - p_n)^2 + 2\alpha t} \quad ,$$

$$x = x_0 + \frac{p_n}{m} t + \frac{1}{3\alpha m} \text{sign}(p_0 - p_n) \left(\left((p_0 - p_n)^2 + 2\alpha t \right)^{3/2} - |p_0 - p_n|^{3/2} \right) \quad .$$

Für $\alpha > 0$ ist die Nulllinie repulsiv, für $\alpha < 0$ attraktiv. Die approximierten Trajektorien sind in Bild 2.17 schematisch dargestellt. Im letzteren Fall wird p_n zum Zeitpunkt $t_s = -(p_0 - p_n)^2 / (2\alpha)$ erreicht, durch dessen Einführung das Verhalten in der Nähe der Nulllinie leichter ersichtlich wird,

$$p = p_n + \text{sign}(p_0 - p_n) \sqrt{(-2\alpha)(t_s - t)} \quad ,$$

$$x = x_0 + \frac{p_n}{m} t + \frac{1}{3\alpha m} \text{sign}(p_0 - p_n) \left(\left((-2\alpha)(t_s - t) \right)^{3/2} - |p_0 - p_n|^{3/2} \right) \quad .$$

Das Verhalten der Trajektorie in x ist (für $p_n \neq 0$) dort in niedrigster Ordnung linear in t , in p ist es proportional zu $\sqrt{t_s - t}$, womit sie dort eine parabolische Form besitzt und den Wert p_n parallel zu p erreicht. Dies ist eine direkte Folge des Ansatzes (2.30), welcher für \dot{x} im Gegensatz zu \dot{p} keine unmittelbaren Singularitäten enthält. Ein zeitliches Potenzverhalten in p tritt in x mit um 1 erhöhter Potenz auf, wodurch das Verhalten im Ort wie gesehen durch einen linearen Ausdruck dominiert wird.

Dieses Verhalten gilt auch für allgemeinere Nulllinien, die z. B. durch einen linear parametrisierten Nenner wie in $1/(A(t)x + B(t)p + C(t)) = \dot{p}$ approximiert werden können. Dabei werden auch $A(t)$, $B(t)$ und $C(t)$ als lineare Funktionen in t betrachtet. Approximiert man $x(t)$ entsprechend linear, so kann man den allgemeineren Ansatz

$$\dot{p} = \frac{\alpha_n + \dot{\alpha}_n t}{p - p_n - \dot{p}_n t}$$

untersuchen. Mit der Substitution $\dot{p} = Z$ erhält man die separierte Gleichung

$$\frac{\dot{Z}}{(\dot{\alpha}_n + \dot{p}_n Z - Z^2)Z} = \frac{1}{\alpha_n + \dot{\alpha}_n t} \quad , \quad Z_0 = \frac{\alpha_n}{p_0 - p_n}$$

mit der (impliziten) Lösung

$$\begin{aligned} C_0(\alpha_n + \dot{\alpha}_n t) &= Z \left(Z - \frac{\dot{p}_n}{2} - \sqrt{\frac{\dot{p}_n^2}{4} + \dot{\alpha}_n} \right)^{-\frac{1}{2} + \frac{\dot{p}_n}{4}} / \sqrt{\frac{\dot{p}_n^2}{4} + \dot{\alpha}_n} \\ &\quad \cdot \left(Z - \frac{\dot{p}_n}{2} + \sqrt{\frac{\dot{p}_n^2}{4} + \dot{\alpha}_n} \right)^{-\frac{1}{2} - \frac{\dot{p}_n}{4}} / \sqrt{\frac{\dot{p}_n^2}{4} + \dot{\alpha}_n} \quad , \\ C_0 &= \frac{1}{\alpha_n} Z_0 \left(Z_0 - \frac{\dot{p}_n}{2} - \sqrt{\frac{\dot{p}_n^2}{4} + \dot{\alpha}_n} \right)^{-\frac{1}{2} + \frac{\dot{p}_n}{4}} / \sqrt{\frac{\dot{p}_n^2}{4} + \dot{\alpha}_n} \\ &\quad \cdot \left(Z_0 - \frac{\dot{p}_n}{2} + \sqrt{\frac{\dot{p}_n^2}{4} + \dot{\alpha}_n} \right)^{-\frac{1}{2} - \frac{\dot{p}_n}{4}} / \sqrt{\frac{\dot{p}_n^2}{4} + \dot{\alpha}_n} \quad . \end{aligned}$$

In der Umgebung der Singularität $p_s = p_n + \dot{p}_n t_s$ mit $C_0(\alpha_n + \dot{\alpha}_n t_s) = 1$ reduziert sich die Lösung für Z in niedrigster nichttrivialer Ordnung zu ($C_0 < 0$)

$$1 + \frac{\dot{\alpha}_n}{2Z^2} = 1 + (-C_0)\dot{\alpha}_n(t_s - t) \quad , \quad Z = -\text{sign}(p_0 - p_n) \sqrt{\frac{1}{2(-C_0)(t_s - t)}} \quad .$$

Daraus folgt die Lösung

$$\begin{aligned} p &= p_s + \text{sign}(p_0 - p_n) \sqrt{\frac{2(t_s - t)}{-C_0}} \quad , \\ x &= x_s - \frac{p_s}{m}(t_s - t) - \text{sign}(p_0 - p_n) \frac{2}{3m} \sqrt{\frac{2(t_s - t)^3}{-C_0}} \end{aligned}$$

für p und x . Sie besitzt also das diskutierte parabolische Verhalten.

Im Falle eines attraktiven Nulllinienabschnitts werden positive Dichten zu dieser Linie hin beschleunigt, von der anderen Seite geschieht das Analoge mit negativen Dichten. Bei repulsiven Abschnitten werden positive und negative Dichten von der Linie weg beschleunigt. An den Nulllinien findet somit abhängig von Attraktion oder Repulsion die Vernichtung oder Erzeugung positiver und negativer Dichten statt. Beginnt man z. B. eine Trajektorie bei positiven Dichten, so kann diese zu späterer Zeit auf eine Nulllinie treffen. An diesem Punkt kann die Trajektorie als Phasenraumkurve nur fortgesetzt werden, wenn sie im Bereich negativer Dichten zeitlich rückwärts durchlaufen wird. Anfänglich zeitlich vorwärts

durchlaufene Trajektorien in negativen Dichten werden entsprechend bei positiven Dichten rückwärts durchlaufen. Die Richtung der Zeitentwicklung von einem Anfangspunkt aus ist a priori nicht festgelegt. Wenn man aber positive Dichten mit zeitlicher Vorwärtentwicklung verbindet, so werden damit negative Dichten auf zeitliche Rückwärtentwicklung fixiert, weil die Fortsetzungen der Trajektorien über die Nulllinien hinweg entgegengesetzte Zeitentwicklungen bedingen.

2.10.1 Nullstellen und Reparametrisierung

Wir fassen Ort x und Impuls p als Komponenten eines Vektors \underline{q} auf, $\underline{q} = (x, p)$. Die Stromdichten J_x und J_p lassen sich entsprechend zusammenfassen, $\underline{j} = (J_x, J_p)$. Damit schreiben sich die Bewegungsgleichungen (2.54) als

$$W \frac{d\underline{q}}{dt} = \underline{j}(t, \underline{q}) \quad .$$

Wir bezeichnen mit $\underline{q}_T = \underline{q}_T(t, t^{\text{in}}, \underline{q}^{\text{in}})$ eine Lösung mit den Anfangsbedingungen $\underline{q}^{\text{in}}$ zur Zeit t^{in} , wobei diese durch r und s^{in} parametrisiert werden können, $\underline{q}^{\text{in}} = \underline{q}(s^{\text{in}}, r)$. Die Bahngleichung zur Zeit t_T , $\underline{q} = \underline{q}_T(t_T, t^{\text{in}}, \underline{q}(s, r))$, liefert bei gegebenen Koordinaten \underline{q} die Bahnparameter $t_T = t_T(\underline{q}, t^{\text{in}}, r)$ bzw. $s_T = s_T(\underline{q}, t^{\text{in}}, r)$.

Wir führen nun anstelle von t einen Bahnparameter λ_T in der Bewegungsgleichung ein,

$$W \frac{d\lambda_T}{dt} \frac{d\underline{q}_T}{d\lambda_T} = \underline{j}(t, \underline{q}_T)$$

mit der Bedingung

$$W \frac{d\lambda_T}{dt} = 1 \quad .$$

Die Parametergleichung entlang einer Trajektorie lautet dann

$$\frac{d\lambda_T}{dt} = \frac{1}{W(t, \underline{q}_T(t, t^{\text{in}}, \underline{q}^{\text{in}}))} \quad .$$

Sei $\lambda = \lambda_T(t, t^{\text{in}}, \underline{q}^{\text{in}})$ die Lösung dieser Gleichung, so erhält man daraus durch Umkehrung die Zeit in Abhängigkeit dieses Bahnparameters, $t_\lambda = t_\lambda(\lambda, t^{\text{in}}, \underline{q}^{\text{in}})$. Setzt man t_λ in die Bahnkurve ein, so ergibt sie sich als Funktion des Parameters λ , $\underline{q}_{T,\lambda} = \underline{q}_T(t_\lambda(\lambda, t^{\text{in}}, \underline{q}^{\text{in}}), t^{\text{in}}, \underline{q}^{\text{in}}) = \underline{q}_{T,\lambda}(\lambda, t^{\text{in}}, \underline{q}^{\text{in}})$. Damit erhält man für die Bahngleichung in Abhängigkeit des Parameters λ

$$\frac{d\underline{q}_{T,\lambda}}{d\lambda} = \frac{dt_\lambda}{d\lambda} \frac{d\underline{q}_T}{dt}(t_\lambda, t^{\text{in}}, \underline{q}^{\text{in}}) = \underline{j}(t_\lambda(\lambda, t^{\text{in}}, \underline{q}^{\text{in}}), \underline{q}_{T,\lambda}) \quad .$$

Wir betrachten nun die Wigner-Funktion entlang der Trajektorie, indem die Zeit und die Koordinaten in Abhängigkeit des Bahnparameters verwendet werden,

$$W_\lambda = W\left(t_\lambda(\lambda, t^{\text{in}}, \underline{q}^{\text{in}}), \underline{q}_{T,\lambda}(\lambda, t^{\text{in}}, \underline{q}^{\text{in}})\right) = W_\lambda(\lambda, t^{\text{in}}, \underline{q}^{\text{in}}) \quad .$$

Die Trajektorie soll einen negativen Bereich durchlaufen. Dazu nehmen wir vereinfachend an, daß sich W entlang der Bahnkurve in der Form

$$W_{\lambda,N} = \beta^{-1}(\lambda - \alpha_1)(\lambda - \alpha_2)$$

ausdrücken läßt, wobei die Größen $\beta, \alpha_1, \alpha_2$ von t^{in} und $\underline{q}^{\text{in}}$ abhängen. Der Bahnparameter erfüllt dann die Gleichung

$$\frac{d\lambda}{dt} = \frac{1}{W_{\lambda,N}(\lambda, t^{\text{in}}, \underline{q}^{\text{in}})} = \frac{\beta}{(\lambda - \alpha_1)(\lambda - \alpha_2)} \quad .$$

Sie kann direkt integriert werden, und mit der Wahl $\lambda^{\text{in}} = \lambda(t^{\text{in}}) = 0$ erhält man für die Umkehrung nach t

$$t_\lambda(\lambda) = t^{\text{in}} + \frac{1}{\beta} \lambda \left(\frac{1}{3} \lambda^2 - \frac{1}{2} (\alpha_1 + \alpha_2) \lambda + \alpha_1 \alpha_2 \right) \quad .$$

In der Nähe der Nullstellen $\alpha_i, i = 1, 2$, von $W_{\lambda,N}$, die die Extremstellen von t_λ darstellen, gilt $t = t_\lambda(\alpha_i) + C_i(\lambda - \alpha_i)^2$, $C_i = \text{const}$, so daß umgekehrt allgemein λ_T dort mit $\sqrt{t - t_\lambda(\alpha_i)}$ variiert.

2.11 Numerische Berechnung von Trajektorien im Phasenraum

Die Bahnkurven des quantenmechanischen Phasenraums werden durch die Gleichungen (2.54) definiert. Als gekoppelte gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung können sie außerhalb singularer Stellen mit numerischen Standardmethoden gelöst werden. In diesem Fall fiel die Wahl auf ein modifiziertes Runge–Kutta-Verfahren (Merson) in der Implementierung der CERN-Bibliothek [39]. Das Verfahren ist adaptiv, indem die Schrittweite der Integration dem abgeschätzten Fehler innerhalb eines Schritts durch Halbierung oder Verdopplung dieser angepaßt wird. Zur graphischen Darstellung wird die Integration jeweils vom Zeitpunkt t_i zum Zeitpunkt t_{i+1} durchgeführt, wobei diese mit $t_i = t_0 + i \Delta t$ äquidistant gesetzt werden.

Trifft eine Trajektorie (innerhalb eines Zeitintervalls) auf eine Singularität, so wird die Bewegung zu dieser hin beschleunigt, vgl. Abschnitt 2.10. Aufgrund der Adaption wird die Schrittweite verkleinert. Sollte die Singularität überschritten werden, so erfährt die Bewegung eine Beschleunigung in die entgegengesetzte (Impuls-)Richtung, womit eine Iteration um die Singularität herum stattfindet. Das Verfahren wird an dieser Stelle abgebrochen, wenn eine minimale (zeitliche) Überschreitung der Singularität dadurch festgelegt ist, daß aufgrund einer minimalen Schrittweite der Iteration der bis dahin gefundene minimale Zeitwert

nach einer kleinen Anzahl von weiteren Überschreitungen nicht mehr unterschritten wird. Dabei werden die Koordinaten am kleinsten Zeitwert als hinreichende Näherung für die Lage der Singularität auf der Bahnkurve angesehen.

Zur Fortsetzung der Bahnkurve werden aus den zuvor bestimmten Koordinaten der Singularität auf der Kurve durch kleine Verschiebungen neue Koordinaten bestimmt. Der Impuls wird dabei um einen kleinen Wert, $|\Delta p_s| = \varepsilon_p \max(1, |p_n|)$, $\varepsilon_p = 10^{-8}$, p_n : Impulskoordinate der Singularität, geändert. Aus der Lösung der Bahnkurven in der Nähe der Nulllinie von W aus Abschnitt 2.10 ergab sich mit der Approximation $\dot{p} = \alpha/(p - p_n)$ die Zeitdifferenz $|\Delta t_s| = (p - p_n)^2/(2|\alpha|)$. Zur Bestimmung von α könnte man W an der Stelle der neuen Koordinaten berechnen ($|\Delta t_s|$ und $|\Delta x_s| \approx |p_n \Delta t_s|/m$ als klein angenommen). Andererseits kann die zu W , siehe (2.40), gehörende Impulsableitung $\partial W/\partial p$, aus der sich $\alpha = J_p/(\partial W/\partial p)$ ergibt, ebenfalls als Summenausdruck geschrieben werden,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial p} W(x, p, t) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{J_1, J_2=1}^N \left[\Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1-1} + \tilde{x}_{J_2-1})\right) - \Theta\left(x - \frac{1}{2}(\tilde{x}_{J_1} + \tilde{x}_{J_2})\right) \right] \\ &\times \sum_{n_1, n_2=1}^{N_B} e^{-i(E_{n_2} - E_{n_1})t/\hbar} \sum_{\sigma_1, \sigma_2=\pm 1} \left[\frac{1}{\hbar} \frac{\gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)}}{\left(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)})\right)^2} \right. \\ &\times \left(\left(i + x_b(x, J_1, J_2) \left(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}) \right) \right) \right) \quad (2.55) \\ &\times e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \left(x + \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1}\right)} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} \left(x - \frac{x_b(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1}\right)} e^{i\frac{p}{\hbar} x_b(x, J_1, J_2)} \\ &- \left(i + x_a(x, J_1, J_2) \left(\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}) \right) \right) \\ &\times \left. e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} \left(x + \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_1-1}\right)} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} \left(x - \frac{x_a(x, J_1, J_2)}{2} - x_{J_2-1}\right)} e^{i\frac{p}{\hbar} x_a(x, J_1, J_2)} \right] . \end{aligned}$$

Im Falle von verschwindenden Nennern im obigen Ausdruck sind Terme der Art $((i + \lambda x_b) e^{i\lambda x_b} - (i + \lambda x_a) e^{i\lambda x_a})/\lambda^2$ für $\lambda \rightarrow 0$ durch die Grenzwerte $i(x_b^2 - x_a^2)/2$ zu ersetzen, womit der Ausdruck in der zweiten eckigen Klammer von (2.55) ersetzt wird durch:

$$\begin{aligned} &\frac{p}{\hbar} - \frac{1}{2}(\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} + \sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)}) \rightarrow 0 : \\ &\rightarrow \gamma_{\sigma_1, n_1}^{(J_1)*} \gamma_{\sigma_2, n_2}^{(J_2)} e^{-i\sigma_1 k_{n_1}^{(J_1)*} (x - x_{J_1-1})} e^{i\sigma_2 k_{n_2}^{(J_2)} (x - x_{J_2-1})} \\ &\quad \times \frac{i}{2\hbar} (x_b^2(x, J_1, J_2) - x_a^2(x, J_1, J_2)) \quad . \end{aligned}$$

Die sich anschließende Integration wird von den neuen Koordinaten aus in negativer Zeitrichtung fortgesetzt; in dieser wirkt die Singularität repulsiv. Dabei wird die anfängliche zeitliche Schrittweite der Integration zu $|\Delta t_s|$ gesetzt. Allgemein werden für die jeweils folgenden Zeitschritte die automatisch angepaßten Schrittweiten des vorhergehenden Schrittes übernommen.

Bei einem erneuten Verlauf der Bahnkurve in eine Singularität wird unter Beachtung des Vorzeichens des zeitlichen Durchlaufs entsprechend verfahren, so daß nachfolgend zunächst wieder in zeitlicher Vorwärtsrichtung integriert wird. Die gesamte Prozedur endet bei Erreichen eines vorgegebenen Endzeitpunkts oder bei Erfüllung spezieller Abbruchkriterien. Das Verfahren ist hier für den Fall einer anfänglichen positiven Zeitentwicklung beschrieben. Eine anfänglich negative Zeitrichtung, die sich aus einem negativen Vorzeichen von W bei den Anfangskordinaten ergibt, bestimmt direkt die anfängliche Zeitrichtung der Integration.

Für gebundene Zustände sind die Stromdichten J_x und J_p stationär, vgl. Abschnitt 2.9.3, und es ergeben sich geschlossene Bahnkurven, vgl. Abschnitt 2.12.1. In diesem Fall wird das Verfahren abgebrochen, wenn im Rahmen der Genauigkeit des vorgegebenen Zeitschritts Δt die Anfangskordinaten der Trajektorie wieder erreicht werden. Bei anfänglich positiver Zeitrichtung wird z. B. vereinfachend überprüft, ob (1) bei positivem bzw. negativem Anfangsimpuls die Anfangsortskordinate zwischen der Ortskordinate des vorhergehenden und aktuellen Zeitschritts liegt, wobei die Bewegungsrichtung mit dem anfänglichen Impulsvorzeichen übereinstimmen muß, oder (2) die Bahnkurve bezüglich der Ortskordinate eine Bewegungsumkehr vollführt, welche anhand der drei letzten Orte festgestellt wird, wobei der Anfangsort außerhalb des von den drei Orten bestimmten Intervalls auf der Seite des vorletzten Ortes liegt und einen Abstand von diesem von höchstens einer Intervalllänge besitzt. Eine Verschärfung dieser Bedingungen ist möglich durch die Forderung der Übereinstimmung der momentanen Impulswerte mit dem Anfangsimpuls innerhalb bestimmter Grenzen.

2.12 Trajektorien in verschiedenen Systemen

2.12.1 Eigenzustände im tiefen Kasten

Wir untersuchen zunächst Trajektorien für gebundene (stationäre) Zustände und betrachten den Fall des tiefen Kastens. Die Wigner-Funktionen und die zugehörigen Ströme sind in Abschnitt 2.9.3 angegeben. Da diese Funktionen stationär sind, ergeben sich geschlossene Kurven für die Stromtrajektorien, und verschiedene Kurven schneiden einander nicht.

Bild 2.18 zeigt ausgewählte Trajektorien des Grundzustands aus Bild 2.1 mit verschiedenen Anfangsbedingungen. Innerhalb eines „klassischen“ Bereichs, welcher durch Trajektorien mit den Anfangsbedingungen $x_0 = d/2$, $0 < p_0 < p_{1,kl} < 2\pi\hbar/d$, $p_{1,kl} \approx 1.638 \pi\hbar/d$, definiert werden kann, bleiben diese während der zeitlichen Entwicklung bei positiven Werten der Wigner-Funktion. Dieses einfach zusammenhängende Gebiet besitzt bei $x_0 = d/2$ die Ausdehnung $-p_{1,kl} < p < p_{1,kl}$. Trajektorien mit kleinen Anfangsimpulsen bei $x = d/2$ werden weit vor der Potentialwand abgebremst und kehren ihre Richtung um, solche mit großen Anfangsimpulsen werden erst zur Wand hin beschleunigt und dann kurz davor abgebremst,

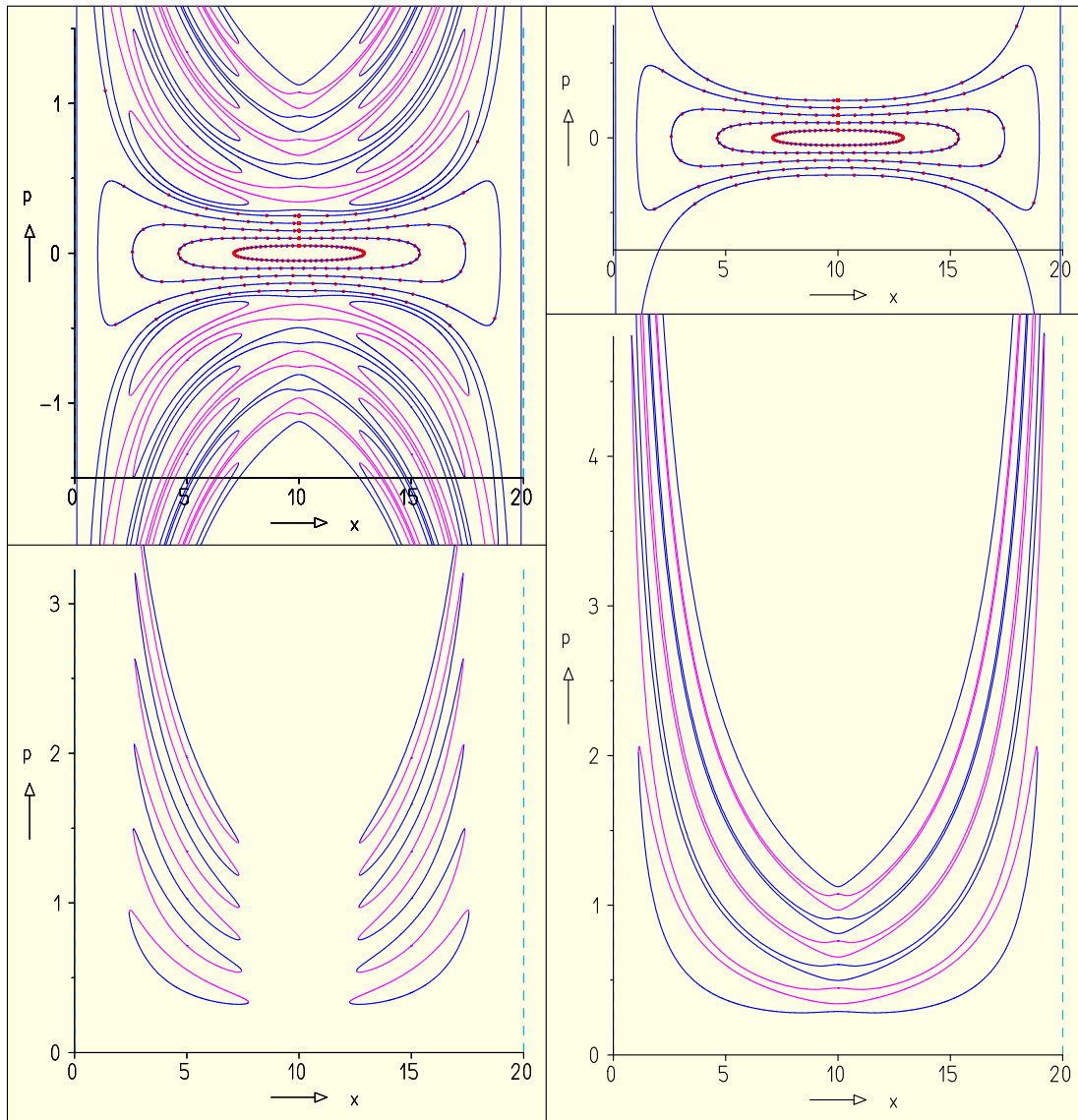


Abbildung 2.18: Stromtrajektorien der Wigner-Funktion des Grundzustandes des tiefen Kastens aus Bild 2.1. Oben links: Gesamtheit verschiedener Klassen der Stromtrajektorien. Oben rechts: Trajektorien im positiven („klassischen“) Bereich der Wigner-Funktion mit Anfangsbedingungen $x_0 = d/2$, $0 < p_0 < p_{1,kl} < 2\pi\hbar/d$. Die Markierungen auf den Kurven sind zeitlich äquidistant ($\Delta t = 5$). Unten links und rechts: Trajektorien mit durchlaufenen negativen Bereichen oberhalb des „klassischen“ Bereichs. Dunkelblaue Kurventeile werden in positiver Zeitrichtung durchlaufen, purpurfarbene in negativer.

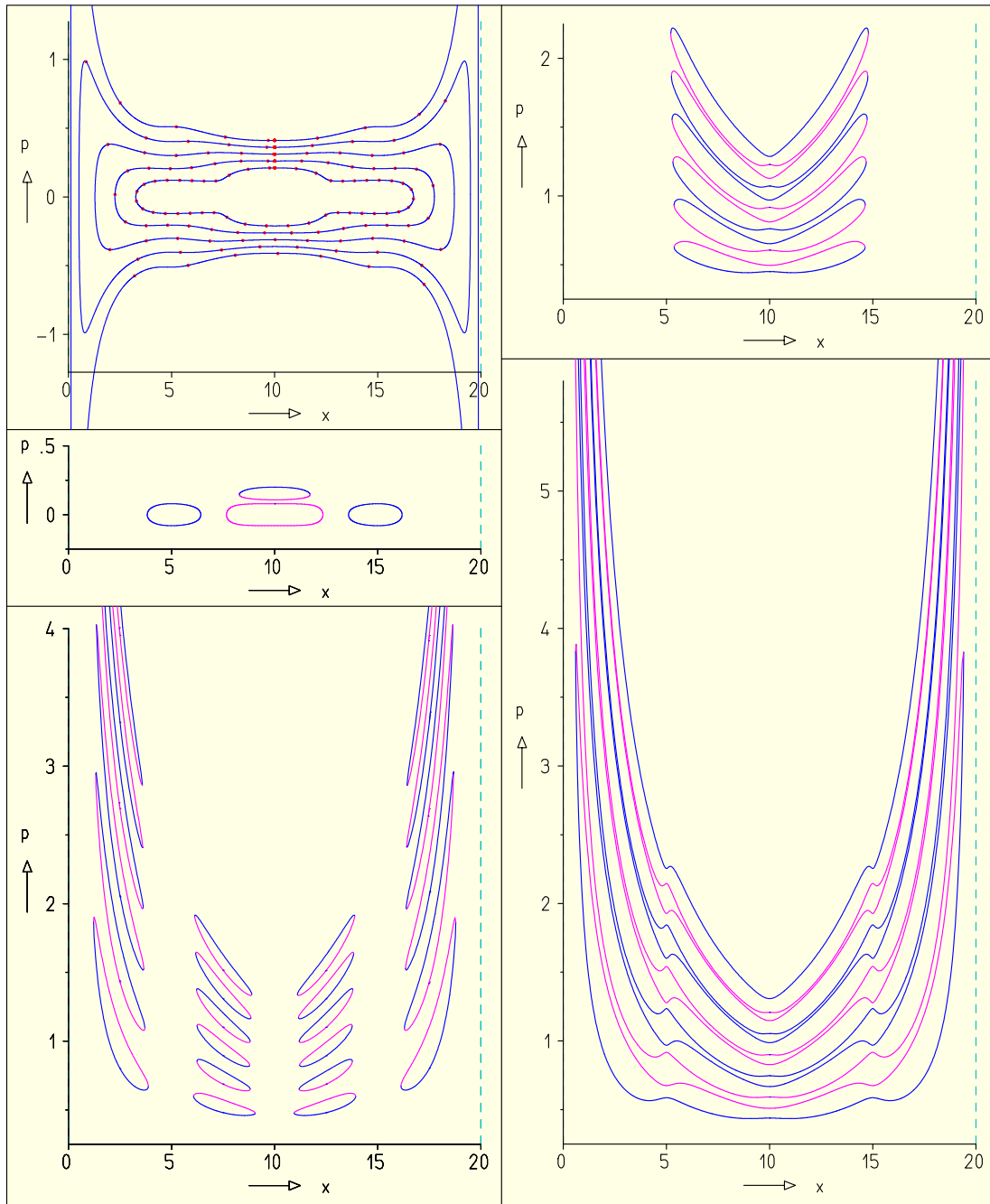


Abbildung 2.19: Stromtrajektorien der Wigner-Funktion des ersten angeregten Zustandes des tiefen Kastens aus Bild 2.2 wie in Bild 2.18. Oben links: Trajektorien im positiven („klassischen“) Bereich der Wigner-Funktion mit Anfangsbedingungen $x_0 = d/2$, $\pi\hbar/d < p_{2-,kl} < p_0 < p_{2+,kl} < 3\pi\hbar/d$. Mitte links: Trajektorien im inneren Bereich mit z. T. durchlaufenen negativen Bereichen. Rechts und unten links: Trajektorien mit durchlaufenen negativen Bereichen oberhalb des „klassischen“ Bereichs.

um dann ihren Impuls umzukehren. Oberhalb und unterhalb (in p) dieses Gebiets ist die Wigner-Funktion W indefinit (Bild 2.1). Trajektorien in diesen Gebieten durchlaufen Bereiche mit positiven und negativen Werten von W . Sie sind im Bild durch verschiedenartige Linien kenntlich gemacht. Dabei läuft die Zeit bei negativen Werten rückwärts. Man kann die auftretenden Trajektorien in verschiedene Klassen einteilen. Eine Klasse besteht aus einer Serie von Scharen von Trajektorien, von der repräsentativ jeweils einige in Einzelbildern gezeigt werden. Für den Grundzustand sind dies zum einen Trajektorien, welche fast von einem Potentialwall zum anderen reichen, jeweils durch einen positiven und einen negativen Bereich laufen und zu den Rändern hin beschleunigt werden (unten rechts). Zum anderen sind dies Trajektorien, die innerhalb einer Schar der vorher beschriebenen Klasse und ebenso durch einen positiven und einen negativen Bereich laufen, sich dabei aber nur in einer Hälfte des Kastens befinden (unten links).

Für den ersten angeregten Zustand ($n = 2$) aus Bild 2.2 zeigt Bild 2.19 die verschiedenen Klassen von Stromtrajektorien. Der „klassische“ Bereich ist hier nicht einfach zusammenhängend – bei $x = d/2$ ist er durch $\pi\hbar/d < p_{2-,kl} < |p| < p_{2+,kl} < 3\pi\hbar/d$, $p_{2-,kl} \approx 1.3343 \pi\hbar/d$, $p_{2+,kl} \approx 2.628 \pi\hbar/d$, begrenzt. Trajektorien mit dort befindlichen Anfangsbedingungen sind im Teilbild oben links dargestellt. Inmitten des „klassischen“ Bereichs befindet sich der zentrale indefinite Bereich. Dort existieren sowohl Kurven in Gebieten mit einem festen Vorzeichen von W als auch solche mit Anteilen von beiden Vorzeichen (Mitte links). Im außerhalb befindlichen indefiniten Bereich ist die Situation vergleichbar mit der des Grundzustandes in Bild 2.18. Hier existieren ebenso Scharen mit vergleichbaren Eigenschaften, die fast das gesamte Ortsintervall überstreichen (unten rechts), innerhalb derer sich aber von Bild 2.18 etwas abweichende, weitere Scharen befinden. In der örtlichen Mitte sind das solche, die zwischen $d/4$ und $3d/4$ liegen (oben rechts), und solche, die in den einzelnen Vierteln des Kastens liegen (unten links), wobei die Kurvenscharen der mittleren Viertel wiederum in den zuvor genannten eingelagert sind.

Der Fall $n = 11$ aus Bild 2.3 wird in den Bildern 2.20–2.25 behandelt. In Bild 2.20 sind Trajektorien des „klassischen“ Bereichs gezeigt mit Anfangsbedingungen bei $x = d/2$, $10\pi\hbar/d < p_{11-,kl} < |p| < p_{11+,kl} < 12\pi\hbar/d$, $p_{11-,kl} \approx 10.2974 \pi\hbar/d$, $p_{11+,kl} \approx 11.616 \pi\hbar/d$. Die verschiedenen Klassen von Trajektorien des inneren indefiniten Bereichs zeigen die Bilder 2.21 und 2.22. Das obere Teilbild von 2.21 zeigt Elemente von einfachen Kurvenscharen, die als Spezialfall auch zu Punkten entartete Kurven in deren Inneren enthalten. Außer für $p = 0$ liegen diese aus einem Punkt bestehenden Kurven an Stellen mit $W = 0$ und $J_p = 0$, was allgemein für solche Punkte gilt. Die unteren Teilbilder von 2.21 und die oberen von 2.22 zeigen Elemente weiterer Kurvenscharen, die jeweils 3, 5, ..., 19 der einfachen Kurvenscharen umschließen. Die verschiedenen Scharen, die $2(l + 1) + 1$ einfache Scharen umschließen, tun dies auch mit dort liegenden Scharen, die $2l + 1$ einfache Scharen umschließen. Im unteren Teilbild von 2.22 sind repräsentativ Kurven gezeigt, die in fester Zeitrichtung durchlaufen

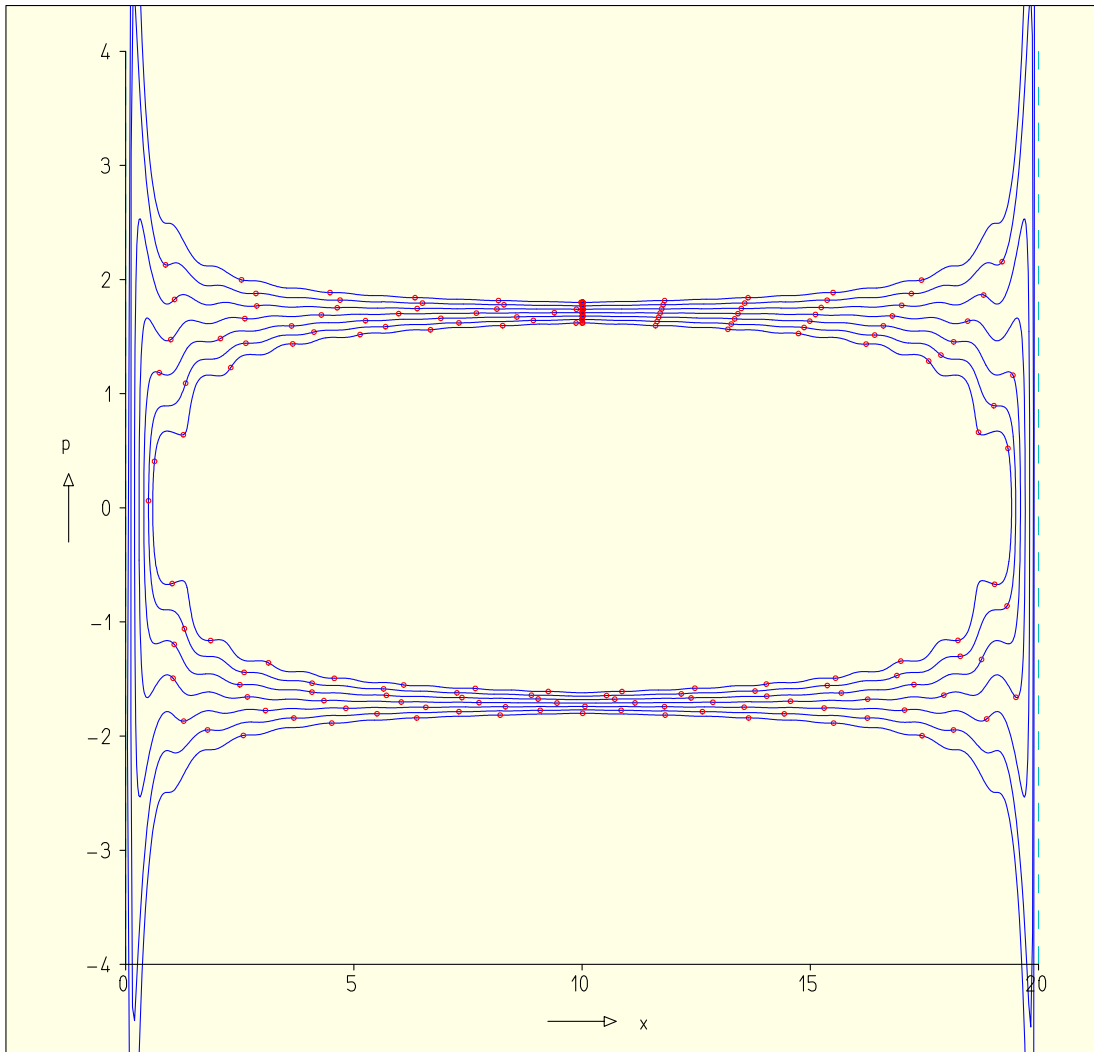


Abbildung 2.20: Stromtrajektorien der Wigner-Funktion des elften Zustandes ($n = 11$) des tiefen Kastens aus Bild 2.3 wie in Bild 2.18. Trajektorien im positiven („klassischen“) Bereich der Wigner-Funktion mit Anfangsbedingungen $x_0 = d/2$, $10 \pi \hbar/d < p_{11-,kl} < p_0 < p_{11+,kl} < 12 \pi \hbar/d$.

werden und zwischen den vorher beschriebenen Kurvenscharen bei positiven und negativen Impulsen verlaufen und damit ebenfalls bis auf die an den „klassischen“ Bereich angrenzenden Scharen die vorher beschriebenen Kurvenscharen umschließen. Oberhalb des „klassischen“ Bereiches (Bilder 2.23–2.25) liegt bezüglich der Umschließungen von Kurvenscharen eine ähnliche Situation vor, die ihrerseits eine Verallgemeinerung der Fälle für $n = 1$ und $n = 2$ (Bilder 2.18 und 2.19) darstellt. Bild 2.23 (oben) zeigt Elemente von dort befindlichen einfachen Kurvenscharen. Darunter und in den Bildern 2.24 und 2.25 sind Kurven gezeigt, die um die örtliche Mitte herum einerseits jeweils $2, 4, \dots, 22$ einfache Kurvenscha-

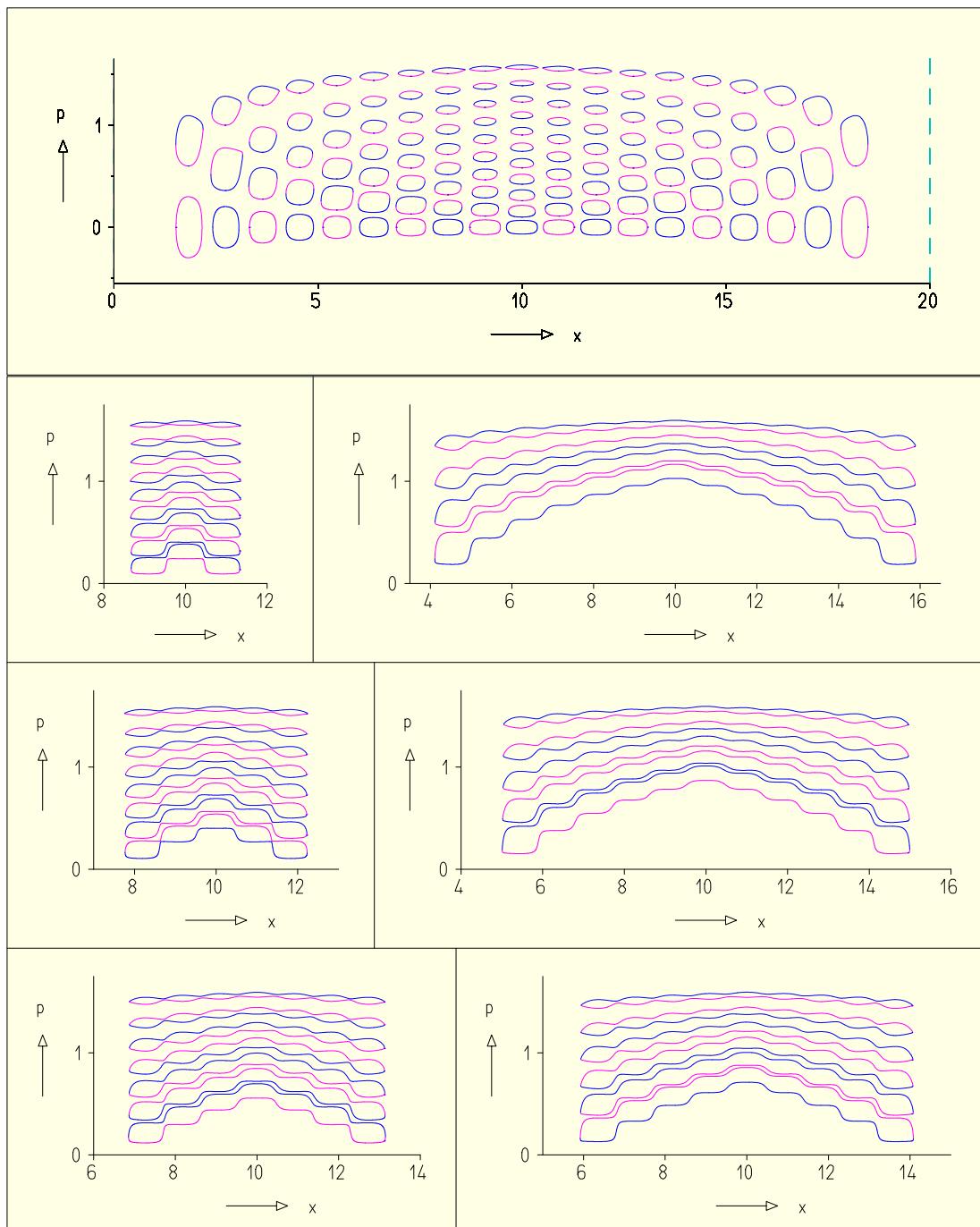


Abbildung 2.21: Fortsetzung. Trajektorien mit durchlaufenen negativen Bereichen im inneren Bereich.

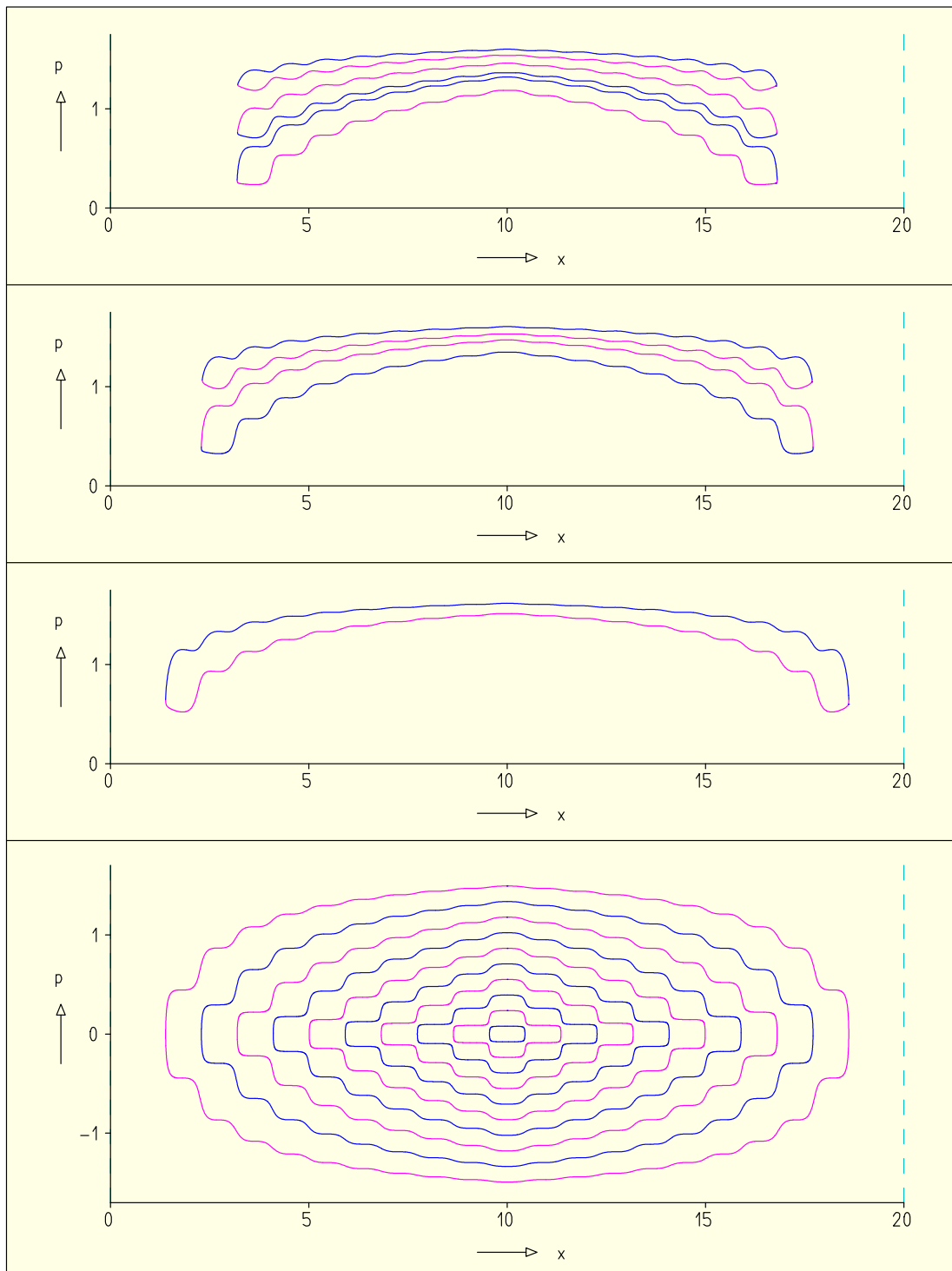


Abbildung 2.22: Fortsetzung. Trajektorien mit durchlaufenen negativen Bereichen im inneren Bereich. Unten: Trajektorien im inneren Bereich mit fester Zeitrichtung.

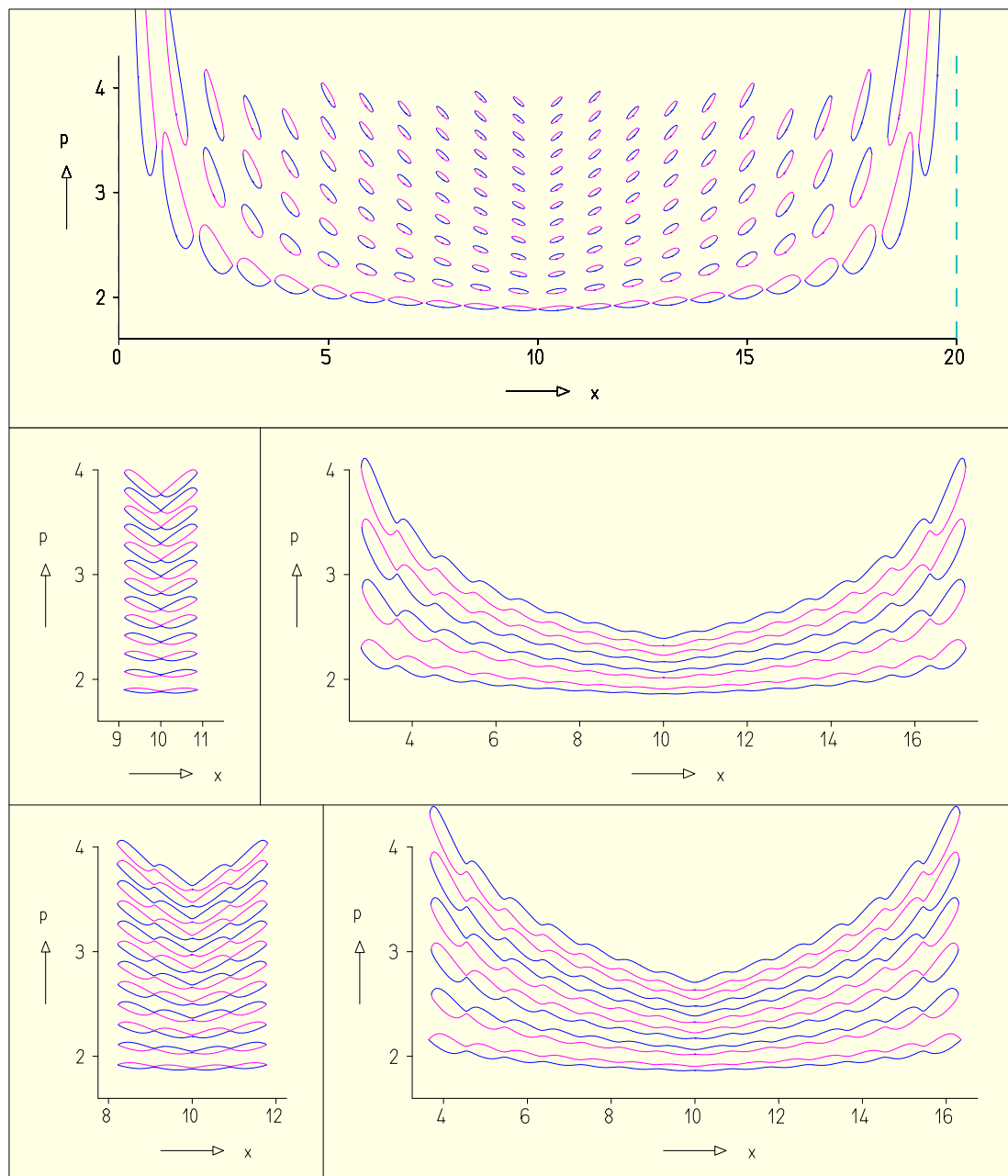


Abbildung 2.23: Fortsetzung. Trajektorien mit durchlaufenen negativen Bereichen oberhalb des „klassischen“ Bereichs.

ren und andererseits auch solche Scharen mit einer kleineren Anzahl enthaltener einfacher Kurvenscharen umschließen. Die äußersten dieser Kurven (Bild 2.25 unten) reichen wie für $n = 1$ und $n = 2$ bis fast an die Potentialwände heran und besitzen folglich ähnliche Eigenschaften.

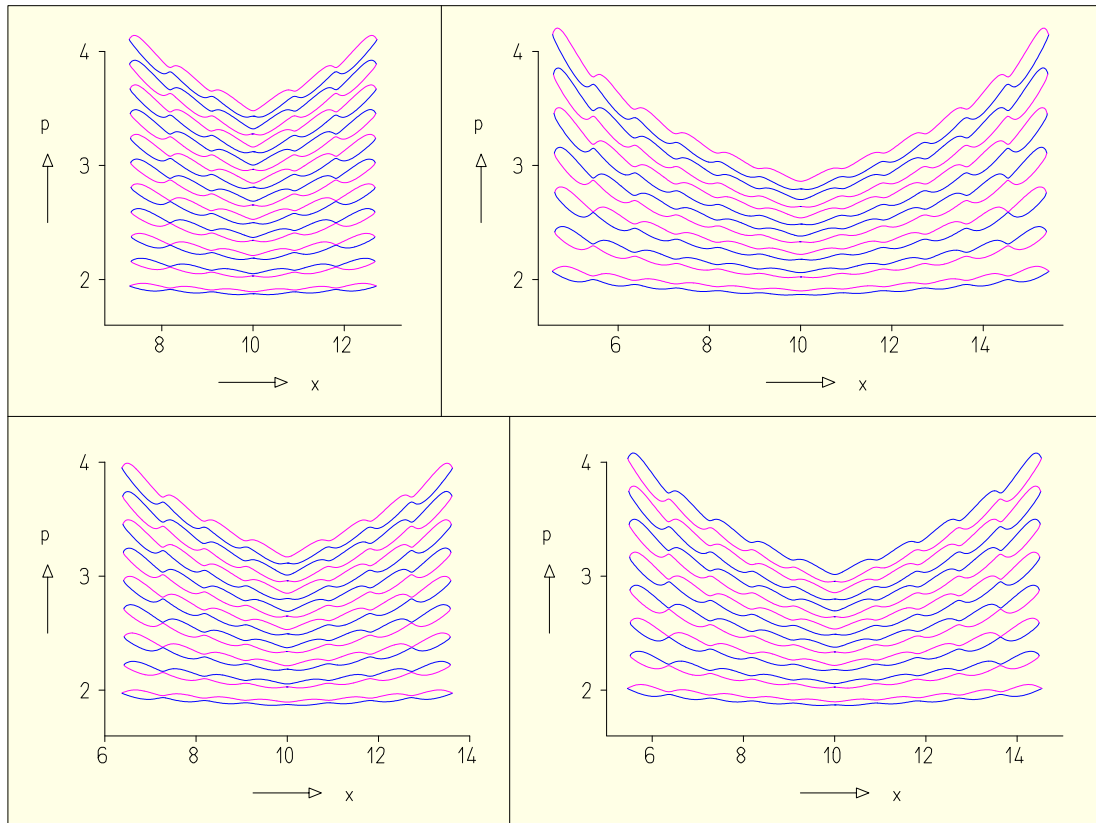


Abbildung 2.24: Fortsetzung. Trajektorien mit durchlaufenen negativen Bereichen oberhalb des „klassischen“ Bereichs.

Für die Eigenzustände des tiefen Kastens betrachten wir schließlich neben den Trajektorien noch Bildmengen von Gebieten unter der Bewegung entlang der Trajektorien. Dabei beschränken wir uns auf Gebiete innerhalb des „klassischen“ Bereichs und speziell auf Anfangsbedingungen bestehend aus achsenparallelen Ellipsen in der Mitte des Kastens.

In Bild 2.26 sind die Zeitentwicklungen (links: $n = 1$, rechts: $n = 2$) des Randes eines elliptischen Gebiets ($\bar{x} = d/2$, $\bar{p} = n\pi\hbar/d$, $\Delta x = 0.03 d$, $\Delta p = 0.6 \hbar/d$) in acht Zeitschritten gezeigt. Die gesamten Zeitintervalle entsprechen etwa einer klassischen Periode des mittleren Impulses, $T_1 \approx 0.7 T_{\text{kl}}(\bar{p})$ ($n = 1$) bzw. $T_2 \approx 0.85 T_{\text{kl}}(\bar{p})$ ($n = 2$). Die anfänglichen Ellipsen werden bei der Bewegung korreliert und zum Rand hin stark verformt, wobei auch die überdeckte Phasenraumfläche deutlich zunimmt. Nach der Reflexion bildet sich eine langgestreckte Form heraus, und in der Kastenmitte wird die Phasenraumfläche wieder kleiner (minimal). Ähnliches gilt für die zweite Reflexion bis zum Ende des ersten Umlaufs.

Die entsprechende Situation für $n = 11$ ist in Bild 2.27 (oben links) gezeigt mit $T_{11} \approx 0.975 T_{\text{kl}}(\bar{p})$. Das prinzipielle Verhalten ist dasselbe, wobei die Di-

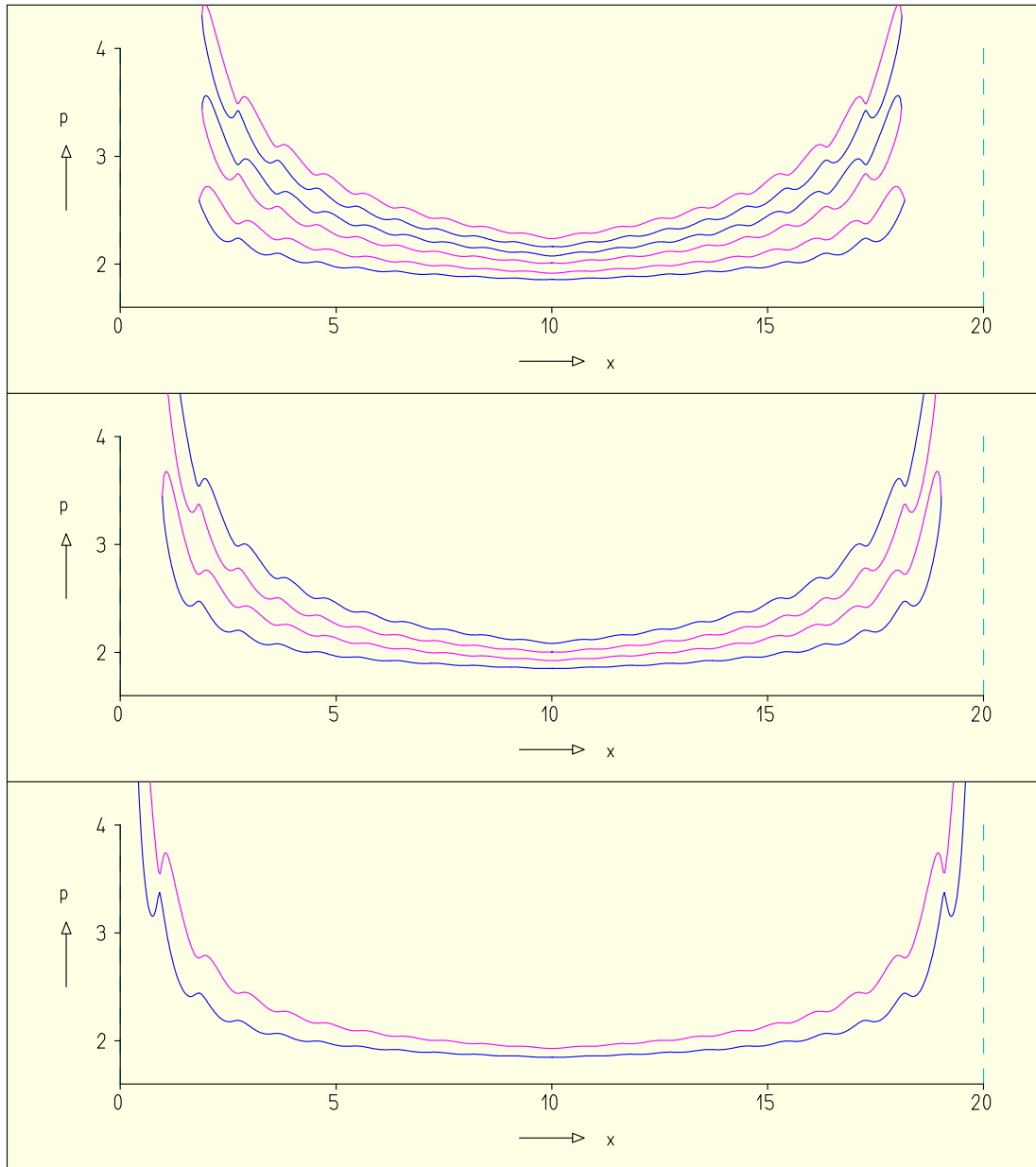


Abbildung 2.25: Fortsetzung. Trajektorien mit durchlaufenen negativen Bereichen oberhalb des „klassischen“ Bereichs.

spersion weniger stark ist, was vorwiegend auf das kleinere Verhältnis von $\Delta p/\bar{p}$ zurückzuführen ist. Das Teilbild oben rechts zeigt (in p) vergrößert die Situation nach einschließlich drei vollständigen Umläufen. Darunter befindet sich eine entsprechende Abbildung für ein größeres Gebiet ($\Delta x = 0.05 d$, $\Delta p = \hbar/d$) und zwei Umläufe. In den unteren beiden Teilbildern sind für größere Gebiete Abbildungen mit $n = 25$, $T_{25} \approx 0.9768 T_{kl}(\bar{p})$ und drei (links) bzw. mit $n = 50$,

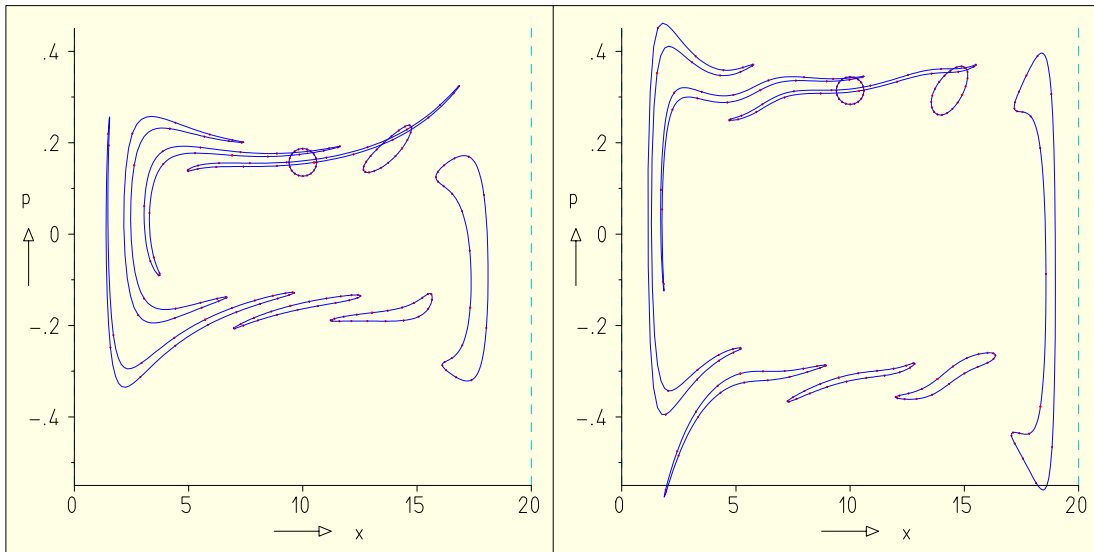


Abbildung 2.26: Abbildung von Gebietsrändern durch Trajektorien des „klassischen“ Bereichs von Eigenzuständen des tiefen Kastens. Die Berandungen liegen anfänglich örtlich zentral und sind als achsenparallele Ellipsen ($\Delta x = 0.03 d$, $\Delta p = 0.6 \hbar/d$) gewählt. Abbildung in acht Zeitschritten durch Stromtrajektorien des Grundzustands (links) und des ersten angeregten Zustands (rechts). Das gesamte Zeitintervall entspricht jeweils grob einer klassischen Periode.

$T_{50} \approx 0.9804 T_{\text{kl}}(\bar{p})$ und sieben vollständigen Umläufen (rechts) dargestellt. Mit jedem Umlauf werden Ort und Impuls stärker korreliert, und mit wachsendem n werden die Oszillation in Richtung der geringeren Ausdehnung des transformierten Gebiets kleiner.

2.12.2 Wellenpaket im tiefen Kasten und Streuung an Potentialbarrieren

In diesem Abschnitt betrachten wir Trajektorien von Wellenpaketen im tiefen Kasten und solche bei Streuungen an in einen Kasten eingebetteten Stufenpotentialen. Als Wellenpakete werden quasi-gaußsche verwendet, die anfangs keine x - p -Korrelation besitzen und sich weitgehend in einem Bereich mit $V = 0$ befinden. Die zugehörigen Wigner-Funktionen und Impulsstromdichten sind in den Abschnitten 2.9.4 und 2.9.5 gezeigt.

Bild 2.28 zeigt Trajektorien und Abbildungen von Gebieten durch Trajektorien des Wellenpaketes aus Bild 2.4. Im Teilbild oben links sind Trajektorien dargestellt, die bei $x = \bar{x}_0 = d/2$, $p = \bar{p}_0 + n\sigma_{p0}$, $n = -2, -1, 0, 1, 2$, des zugrundeliegenden gaußschen Wellenpaketes beginnen, an der harten Wand reflektiert werden und bis zum Zeitpunkt eines halben klassischen Umlaufs der mittleren Trajektorie ($p = \bar{p}_0$) laufen. Für Impulse unterhalb des Mittelwertes werden die

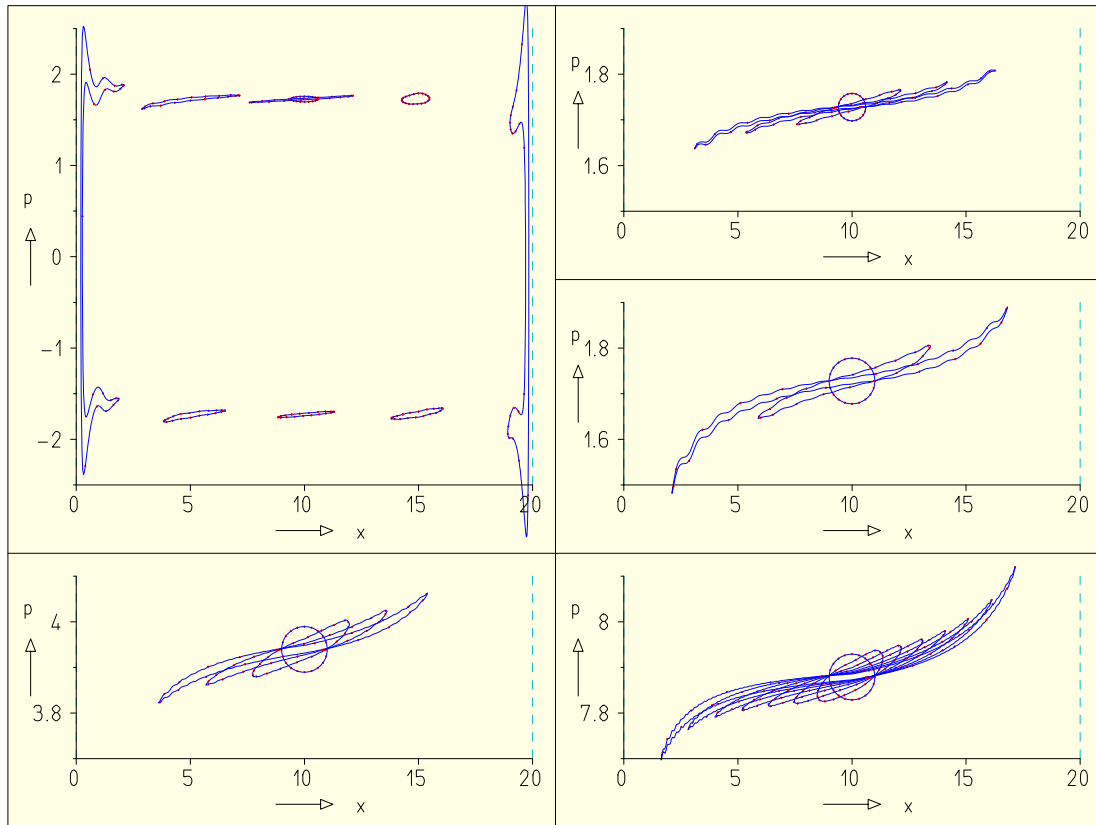


Abbildung 2.27: Abbildung von Gebietsrändern wie in Bild 2.26. Oben links: entsprechende Abbildung für $n = 11$. Oben rechts: Abbildung nach etwa 1, 2 und 3 klassischen Perioden für $n = 11$ (oben) bzw. nach 1 und 2 Perioden eines größer ($\Delta x = 0.05 d$, $\Delta p = \hbar/d$) gewählten Bereichs (unten). Unten: Abbildung eines größeren Bereichs mit $n = 25$ nach etwa 3 (links) und mit $n = 50$ nach etwa 7 klassischen Perioden (rechts).

Trajektorien vor der Wand abgebremst, für Impulse oberhalb zuerst beschleunigt und dann in unmittelbarer Nähe der Wand abgebremst, um dann in entsprechender Weise umzukehren. Dieses Verhalten ähnelt dem bei Eigenzuständen qualitativ. Die hier ausgewählten Trajektorien laufen alle durch Gebiete mit $W > 0$; an der Wand ist dies der in Bild 2.4 erkennbare Kanal. In größerer Entfernung zur Wand ist das Verhalten nahezu klassisch, wobei die Reflexion an der Wand nur zu einer geringen Verzerrung führt. Die Endpunkte der Trajektorien befinden sich nahezu auf einer Geraden.

Die weiteren Teilbilder von 2.28 zeigen die Abbildung durch Trajektorien von anfänglich elliptischen Gebietsberandungen, den λ -fachen Bereichen der Kovarianzellipse des zugrundeliegenden gaußschen Wellenpakets mit $\lambda = 0.5, 1, 1.5$. Gezeigt sind jeweils 6 Zeitpunkte innerhalb einen halben Umlaufs. Die Verzerrungen am Rand bei $x = d$ sind wesentlich kleiner bzgl. der Form und der Phasenraum-

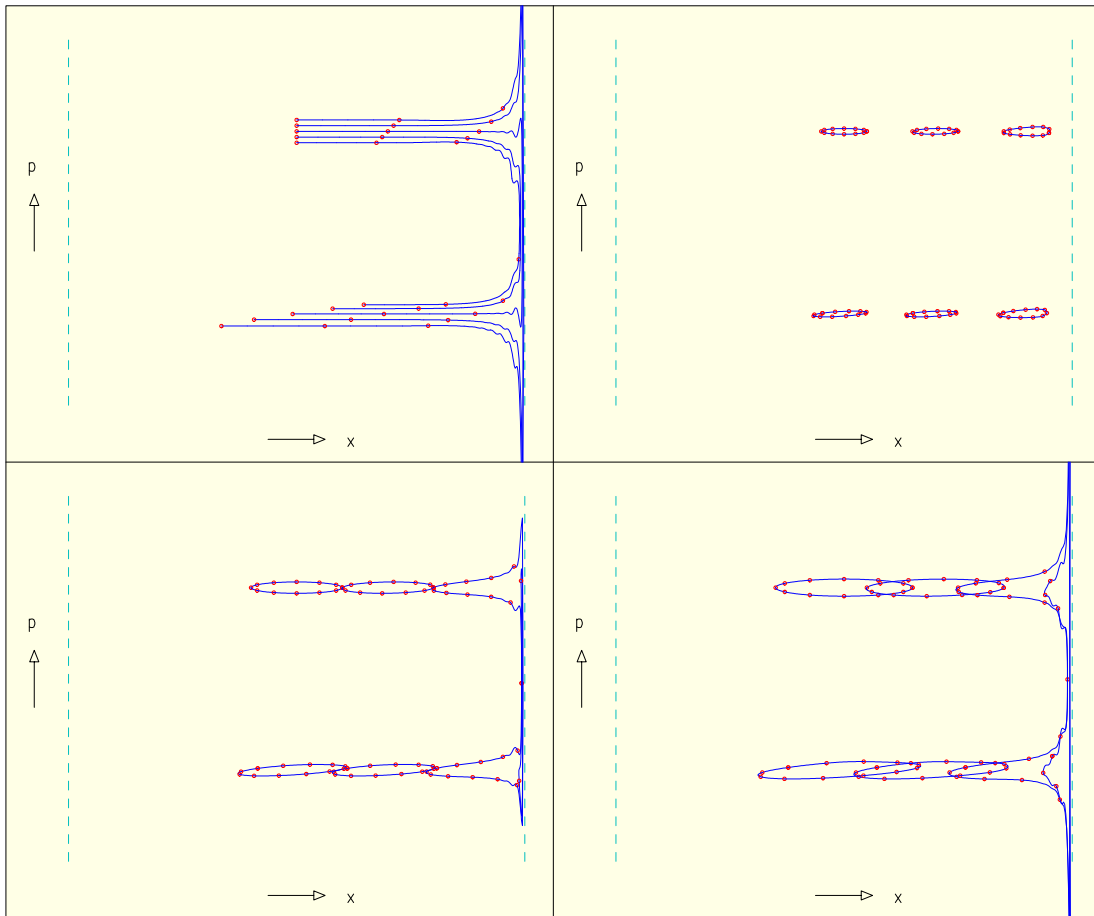


Abbildung 2.28: Stromtrajektorien und Abbildung durch solche des Wellenpakets aus Bild 2.4. Oben links: Trajektorien für die Anfangsbedingungen $x = \bar{x}_0 = d/2$, $p = \bar{p}_0 + n\sigma_{p0}$, $n = -2, -1, 0, 1, 2$, des zugrundeliegenden gaußschen Wellenpakets. Oben rechts und unten: Abbildung durch Trajektorien eines elliptischen Bereichs (λ -facher Bereich der Kovarianzellipse des zugrundeliegenden gaußschen Wellenpakets, $\lambda = 0.5, 1, 1.5$) zu den Zeitpunkten aus Bild 2.4. Die Trajektorien durchlaufen hier nur Gebiete mit $W > 0$. Allgemein werden hier folgende Farbkodierungen für Trajektorien verwendet: Blau und grün entsprechen $W > 0$ und magenta $W < 0$. Grün wird nach dem Passieren eines Gebietes mit $W < 0$ so lange verwendet, bis der späteste Zeitpunkt vor dem Eintreten in ein solches Gebiet wieder erreicht ist.

fläche als im Fall von Eigenfunktionen, vgl. Bild 2.27, oben links. Nach halbem Umlauf hat sich ein nahezu elliptischer Gebietsrand (mit entsprechender Korrelation) zurückgebildet. In Bild 2.27 hingegen sind nach einem Umlauf unabhängig von den anfänglichen Abmessungen der Ellipse signifikante Formänderungen zu beobachten.

Aus diesen Beobachtungen läßt sich erkennen, daß das Verhalten von Wellenpaketen in viel stärkerem Maß dem klassischen Verhalten ähnelt als dies durch Energie-Eigenfunktionen wiedergegeben werden kann. Dies liegt (in diesem Beispiel) unter anderem an den zentral auf die Breite von $\Delta p = 2\pi\hbar/d$ begrenzten Bereichen um $\pm n\pi\hbar/d$ im Impuls, in denen die Wigner-Funktion positive Werte annimmt.

In Bild 2.29 sind Stromtrajektorien für den Tunnelvorgang aus Bild 2.6 dargestellt. Fast das gesamte Wellenpaket befindet sich bei Energien unterhalb der Tunnelbarriere; der Abstand vom Impulserwartungswert zum Tunnelpotential ($V = 11$) beträgt etwa $6.7\sigma_p$.

Im oberen linken Teilbild von 2.29 sind vier Trajektorien (mit verschiedenen Anfangsbedingungen) gezeigt, die je eine Klasse von einfachen Trajektorien charakterisieren. Dabei wurden Fälle gewählt, bei denen $W > 0$ entlang der Kurven bei kleineren Impulsen gilt. Die Bewegung entlang der untersten einlaufenden Trajektorie wird vor der Tunnelbarriere abgebremst und kehrt sich dann (unter eventueller zwischenzeitlicher Beschleunigung zu größeren negativen Impulsen hin) um. Darüber befindet sich eine Kurve, die eine Transmission beschreibt. Die Bewegung wird ebenfalls vor der Barriere abgebremst, führt aber durch diese hindurch und wird dahinter wieder beschleunigt. Wie man an diesem Beispiel deutlich erkennt, sind die Impulse vor und hinter der Barriere leicht verschieden. Dies gilt allgemein und auch für die Beträge von Impulsen reflektierter Bewegungen. Die Bewegung entlang der dritten Trajektorie wird zunächst zur Barriere hin beschleunigt und kurz davor abgebremst. Danach tritt sie in den in Bild 2.7 näher gezeigten, tropfenförmigen Bereich mit $W < 0$ ein und durchläuft diesen zeitlich rückwärts bis sie unten aus diesem Bereich vor der Barriere wieder austritt. Danach verläuft die Bewegung ähnlich zum zweiten Fall, indem sie im Bereich der Barriere abgebremst und dahinter wieder beschleunigt wird. Die Bewegung entlang der vierten Trajektorie ist bis kurz hinter der Barriere mit der dritten vergleichbar. In diesem Fall führt die Beschleunigung aber zu einem Eintritt von unten in den negativen Bereich, und unter zeitlicher Umkehr setzt sich die Beschleunigung fort, bis nach dem Austritt aus diesem Bereich die Abbremsung und der Übergang in die freie Bewegung folgt. Qualitativ verläuft diese Bewegung bezüglich der Barriere (räumlich) gespiegelt ab.

Das untere linke Teilbild von 2.29 zeigt eine Reihe von Trajektorien, die bei $x = \bar{x}$ aber verschiedenen Impulsen beginnen. Die Kurven lassen sich den zuvor beschriebenen Klassen zuordnen, wobei die der reflektierten Bewegungen einen kleinen negativen Bereich der Interferenzzone an der Barriere durchlaufen. Im oberen rechten Teilbild beginnen die Trajektorien bei $x = \bar{x} - \sigma_x$. Es treten mehr und größere negative Bereiche an der Barriere auf. Zwischen reflektierten und transmittierten Trajektorien gibt es eine Kurve, die den Interferenzbereich mehrmals in verschiedenen Zeitrichtungen durchläuft und schließlich innerhalb des betrachteten Zeitintervalls auf einem positiven Bereich der zentralen Interferenzstruktur endet. Das untere rechte Teilbild zeigt die Situation für bei $x = \bar{x} + \sigma_x$

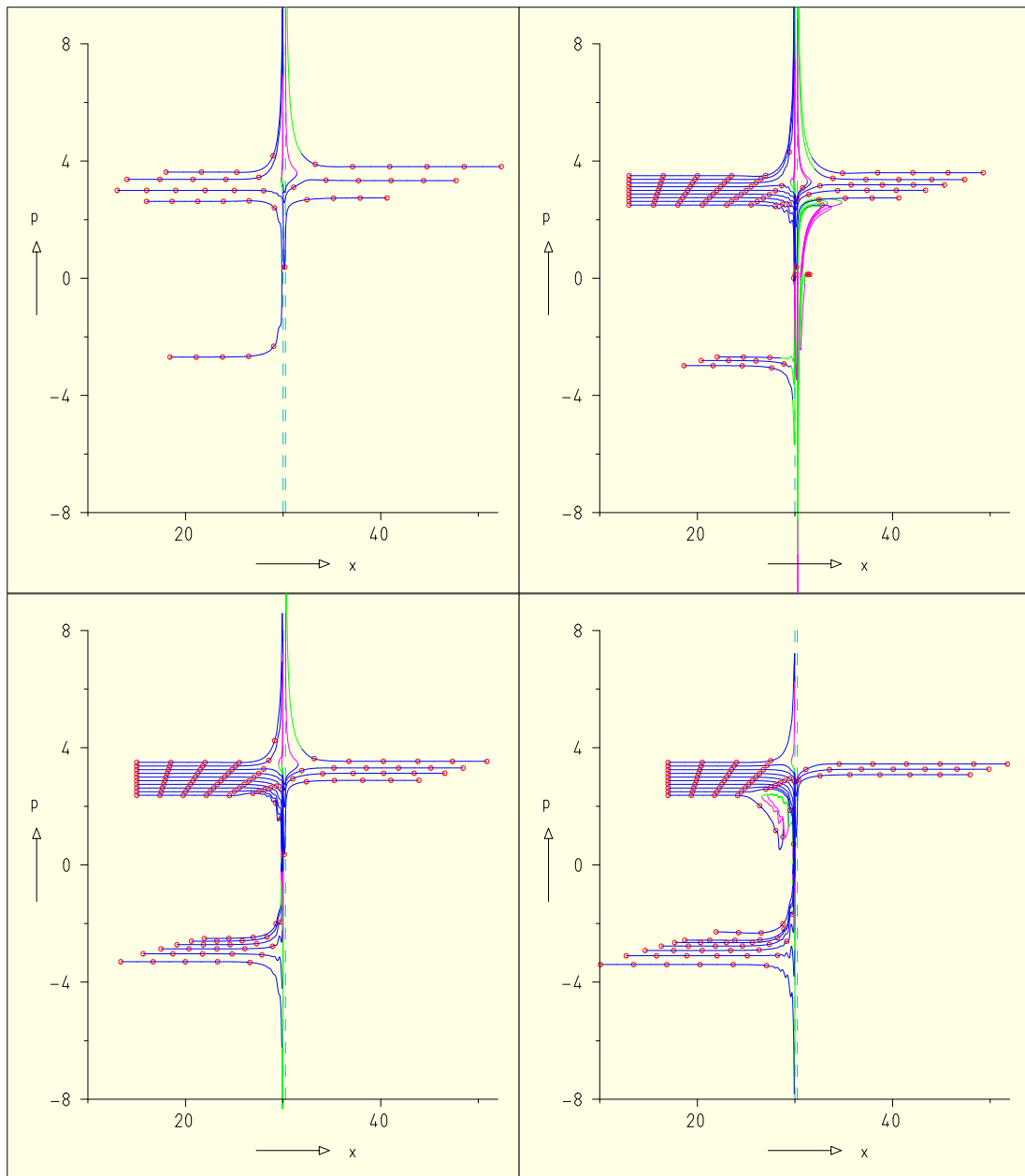


Abbildung 2.29: Stromtrajektorien zum Tunnelvorgang aus Bild 2.6 zu verschiedenen Anfangsbedingungen. Oben links: Klassen einfacher Trajektorien – reflektiert (unten); transmittiert (darüber), direkt, einseitiger und beidseitiger Durchlauf durch den örtlich zentralen negativen Bereich, vgl. Bild 2.7. Oben rechts: Anfangsbedingungen bei $x = \bar{x} - \sigma_x$, $p = \bar{p} + \lambda\sigma_p$, $\lambda = -2, -1.5, \dots, 2$. Unten links: Anfangsbedingungen bei $x = \bar{x}$, $p = \bar{p} + \lambda\sigma_p$, $\lambda = -2.5, -2, \dots, 2$. Unten rechts: Anfangsbedingungen bei $x = \bar{x} + \sigma_x$, $p = \bar{p} + \lambda\sigma_p$, $\lambda = -2.5, -1.5, \dots, 2$.

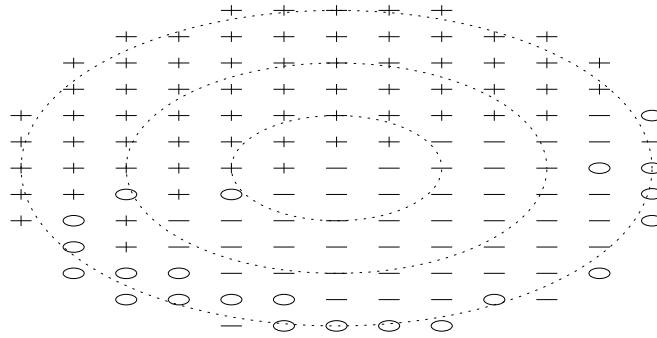


Abbildung 2.30: Startpunkte von Stromtrajektorien der Wigner-Funktion aus Bild 2.6. Die Punkte befinden sich auf einem Gitter mit $x_\mu = \bar{x} + \mu\sigma_x$, $p_\nu = \bar{p} + \nu\sigma_p$, $\mu, \nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Gestrichelt dargestellt sind die λ -fachen Kovarianzellipsen ($\lambda = 1, 2, 3$) der Wigner-Funktion des zugrundeliegenden gaußschen Wellenpakets. Die Markierungen ‚+‘, ‚-‘ oder ‚o‘ bezeichnen transmittierte, reflektierte oder indifferente Kurven (d. h. im Interferenzteil endende). Einige Trajektorien zu den dargestellten Punkten (speziell $x = \bar{x} + \mu\sigma_x$, $\mu = -1, 0, 1$) sind in Bild 2.29 gezeigt.

beginnende Bewegungen. Dabei durchlaufen (wieder) einige reflektierte Kurven kleinere negative Bereiche in der Nähe der Barrierenvorderkante. Die innerste reflektierte Kurve enthält eine teilweise zeitlich umgekehrt durchlaufene Schleife im Interferenzbereich vor der Tunnelbarriere.

Nach der Wechselwirkung mit der Barriere besteht das Wellenpaket aus transmittiertem und reflektiertem Teil sowie dem Interferenz-Term (Bild 2.6). Die anfänglich im Impuls eng beieinanderliegenden Kurven besitzen nachher einen größeren Abstand. Der transmittierte Teil wird hauptsächlich aus den ursprünglichen Anteilen mit höherem Impuls gebildet und der reflektierte Teil aus Anteilen mit niedrigerem Impuls. Daher spreizen die Kurven, die in diesen Anteilen verlaufen, in p . Im transmittierten Teil befinden sich die Kurven gegenüber frühen Zeiten im Mittel bei niedrigeren Impulsen, im Vergleich zum gewichteten Mittel über alle anfänglichen Werte liegt der Mittelwert aber höher. Umgekehrt verhält es sich mit dem reflektierten Teil. Dort liegen die anfänglich niedrigen Impulse im Mittel bei größeren negativen Werten, wobei ihr absoluter Mittelwert gegenüber dem gesamten anfänglichen Mittelwert geringer ausfällt.

Da weit außerhalb der Barriere die Bewegungen entlang der Kurven freie Bewegungen sind, bleiben die Bahnpunkte zu festen Zeiten aber verschiedenen Impulsen auf einer Geraden. Abgesehen von kleinen Verzerrungen gilt diese strenge Korrelation hier auch für die fortgesetzten Kurven im transmittierten und reflektierten Teil. Diese wird auch nicht dadurch gestört, daß die Kurven z. T. durch verschiedene Raumbereiche oder zu großen Teilen durch Gebiete mit $W < 0$ laufen.

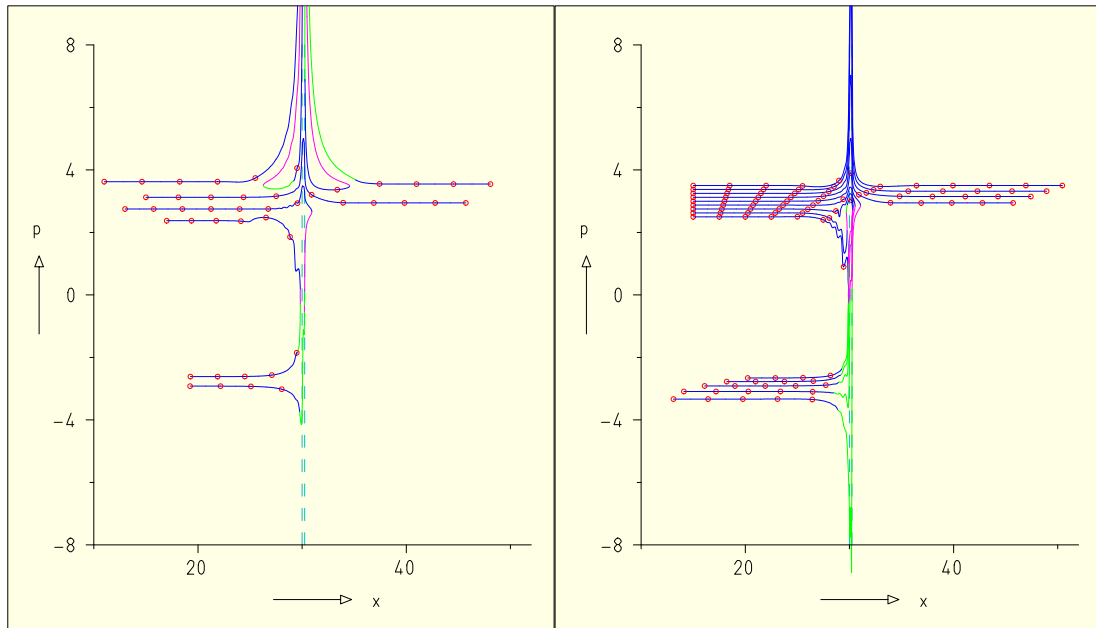


Abbildung 2.31: Stromtrajektorien zum Streuvorgang aus Bild 2.9 zu verschiedenen Anfangsbedingungen. Links: Klassen einfacher Trajektorien – reflektiert (unten), nach intermediärer Transmission und direkt; transmittiert (darüber), direkt und beidseitiger Durchlauf durch einen negativen Bereich außerhalb des Potentials, vgl. auch Bild 2.10. Rechts: Anfangsbedingungen bei $x = \bar{x}$, $p = \bar{p} + \lambda\sigma_p$, $\lambda = -2, -1.5, \dots, 2$.

Abhängig vom Anfangsort werden verschieden große Impulsbereiche transmittiert oder reflektiert. Dies ist in Bild 2.29 daran zu erkennen, daß gegenüber den Anfangsbedingungen bei $x = \bar{x}$ (unten links) für $x = \bar{x} - \sigma_x$ (oben rechts) mehr Linien in den Bereich rechts der Barriere und weniger in den Bereich links führen. Im Fall $x = \bar{x} + \sigma_x$ führen weniger Linien nach rechts und mehr nach links. Es besteht damit eine Korrelation von Ort und Impuls bezüglich Transmission und Reflexion. In Bild 2.30 sind die Startpunkte der Trajektorien mit verschiedenen Symbolen markiert, je nachdem, ob die Kurve eine Transmission oder eine Reflexion beschreibt oder ob die Trajektorie im Interferenzbereich endet. Man erkennt, daß aus dem vorderen Teil ($x > \bar{x}$) Reflexion und im hinteren Teil ($x < \bar{x}$) Transmission bevorzugt wird. Die Trennung erfolgt etwa entlang einer geneigten Geraden. Einige Trajektorien aus dem Bereich dieser Geraden und solche von kleinen Impulsen kommend verlaufen schließlich im Interferenzbereich. Es kann nicht ausgeschlossen werden, daß Trajektorien aus dem sich bildenden Interferenzbereich, vgl. Teilbild 3 aus 2.6, erzeugt werden, welche die später in diesem Bereich endenden ersetzen.

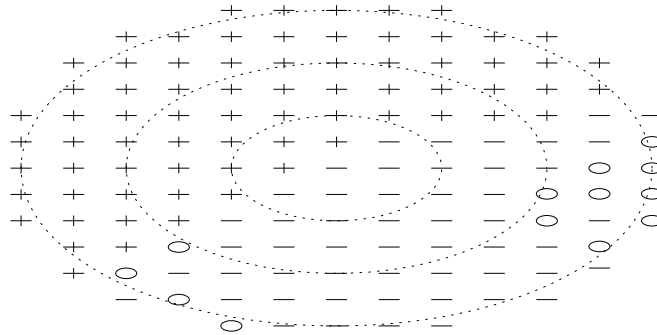


Abbildung 2.32: Startpunkte von Stromtrajektorien der Wigner-Funktion aus Bild 2.9. Darstellung wie in Bild 2.30.

Für den Fall des attraktiven Streupotentials aus Bild 2.9 sind die zugehörigen Trajektorien in Bild 2.31 dargestellt. (Die Potentialbreite und die Parameter des Wellenpakets sind dieselben wie im repulsiven Fall.)

Das linke Teilbild von 2.31 zeigt vier ausgewählte Trajektorien, die wieder verschiedene Klassen charakterisieren. Die unterste einlaufende Kurve kehrt, ähnlich wie im repulsiven Fall, vor dem negativen Potential um. Sie durchläuft hier zusätzlich ein negatives Gebiet im Interferenzbereich. Die Bewegung entlang der darüberliegenden Kurve wird zum Potentialtopf hin beschleunigt und durchläuft diesen. Rechts des Topfes tritt die Kurve von oben in den (umgekehrten) tropfenförmigen negativen Bereich ein und nähert sich dem Potential im Interferenzbereich. Sie durchläuft den Potentialtopf von rechts bei negativen Impulsen und verläßt diesen an der linken Flanke, so daß die Kurve schließlich eine reflektierte Bewegung beschreibt. Entlang der dritten Kurve wird die Bewegung zum Topf hin beschleunigt, durchläuft diesen, wird dahinter wieder abgebremst und beschreibt damit eine einfache Transmission. Als Variante dazu (nicht gezeigt) können transmittierte Kurven, wie die zuvor beschriebene zweite Kurve, durch den tropfenförmigen negativen Bereich führen. In der Folge führt die Kurve aber bei wieder angewachsenem Impuls in den rechten Halbraum. Die oberste gezeigte Kurve durchläuft nach größerer Beschleunigung in einiger Entfernung vor der Potentialstufe einen negativen Bereich oberhalb des Impulserwartungswertes, um dann direkt vor der Potentialstufe wieder beschleunigt zu werden und diese zu passieren. Rechts des Potentials verläuft die Bewegung in diesem Fall qualitativ gespiegelt zur linken Seite. In variierenden Trajektorien können die negativen Bereiche links bzw. rechts des Potentials unabhängig voneinander nicht oder auch öfter durchlaufen werden.

Im rechten Teilbild von 2.31 sind Trajektorien gezeigt, die bei $x = \bar{x}$ und verschiedenen Impulsen beginnen. Die Aufteilung der Trajektorien in transmittierte und reflektierte als auch deren Verhalten außerhalb der Streuregion ist ähnlich wie beim repulsiven Potential, vgl. das untere linke Teilbild von 2.29 mit gleichen Anfangsbedingungen. In der Nähe des Streupotentials verlaufen sie jedoch

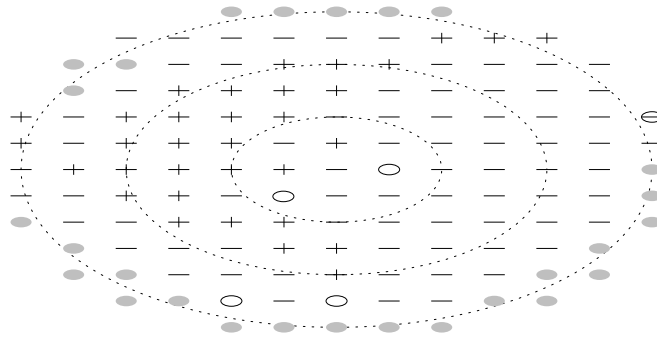


Abbildung 2.33: Startpunkte von Stromtrajektorien der Wigner-Funktion aus Bild 2.12. Darstellung wie in Bild 2.30. Graue Flächen stellen nicht gerechnete Kurven dar; andere Kurven, bei denen bis zum vorgegebenen Endzeitpunkt keine Entscheidung getroffen werden konnte, werden mit mehreren Symbolen belegt.

in verschiedenen Phasenraumbereichen. Bild 2.32 zeigt für den attraktiven Fall die Startpunkte von Trajektorien mit verschiedenen Symbolen gekennzeichnet entsprechend zu Bild 2.30 für die Tunnelbarriere. Die Trennung in transmittierte und reflektierte Teile erfolgt entlang einer ähnlich geneigten Geraden. Im Fall des attraktiven Streupotentials verlaufen einige Kurven, die aus dem vorderen wie auch dem hinteren Bereich bei kleineren Impulsen stammen, schließlich im Interferenzbereich.

Unabhängig vom Vorzeichen des Potentials bestehen daher außerhalb der Streuregion bei geeignet gewählten Parametern bezüglich der Stromtrajektorien große Ähnlichkeiten. Wesentliche Unterschiede in den Kurven treten in der Streuregion auf. Dort ergibt sich zum einen aufgrund des Potentialvorzeichens eine Verzögerung oder eine Beschleunigung. Zum anderen führen die in Abschnitt 2.9.5 beschriebenen Unterschiede in der Wigner-Funktion zu verschiedenen Kurvenverläufen, vgl. auch Bilder 2.6, 2.7, 2.9, 2.10. Dies betrifft die verschiedenen Vorzeichen der Interferenzbereiche, insbesondere die Lage des tropfenförmigen negativen Gebiets oberhalb oder unterhalb des zentralen Maximums bzw. Impulserwartungswerts. Für ein repulsives Potential liegt dieses oberhalb, so daß transmittierte Teile diesen Bereich durchlaufen, und für ein attraktives Potential unterhalb, wodurch vornehmlich reflektierte Teile betroffen sind, vgl. Bilder 2.29 und 2.31. Dadurch wird auch die Rückkehr bereits rechts des negativen Streupotentials befindlicher Teile bewirkt (Bild 2.31). Der betrachtete negative Bereich beeinflußt hier also vorwiegend klassisch verbotene Trajektorien.

Bild 2.33 zeigt die Startpunkte zu Stromtrajektorien für die Resonanzstreuung aus Bild 2.12. In diesem Fall gibt es bei der gewählten Punktdichte im Bereich der Mitte des Wellenpakets keine klare Trennung zwischen Bereichen, die transmittiert, und solchen, die reflektiert werden. Allerdings stammt der größte Anteil des transmittierten Teils wieder aus dem örtlich hinteren Teil des Wellenpakets; dieser Teil liegt im Impuls zentral. Die beiden Gebiete könnten einfach zusam-

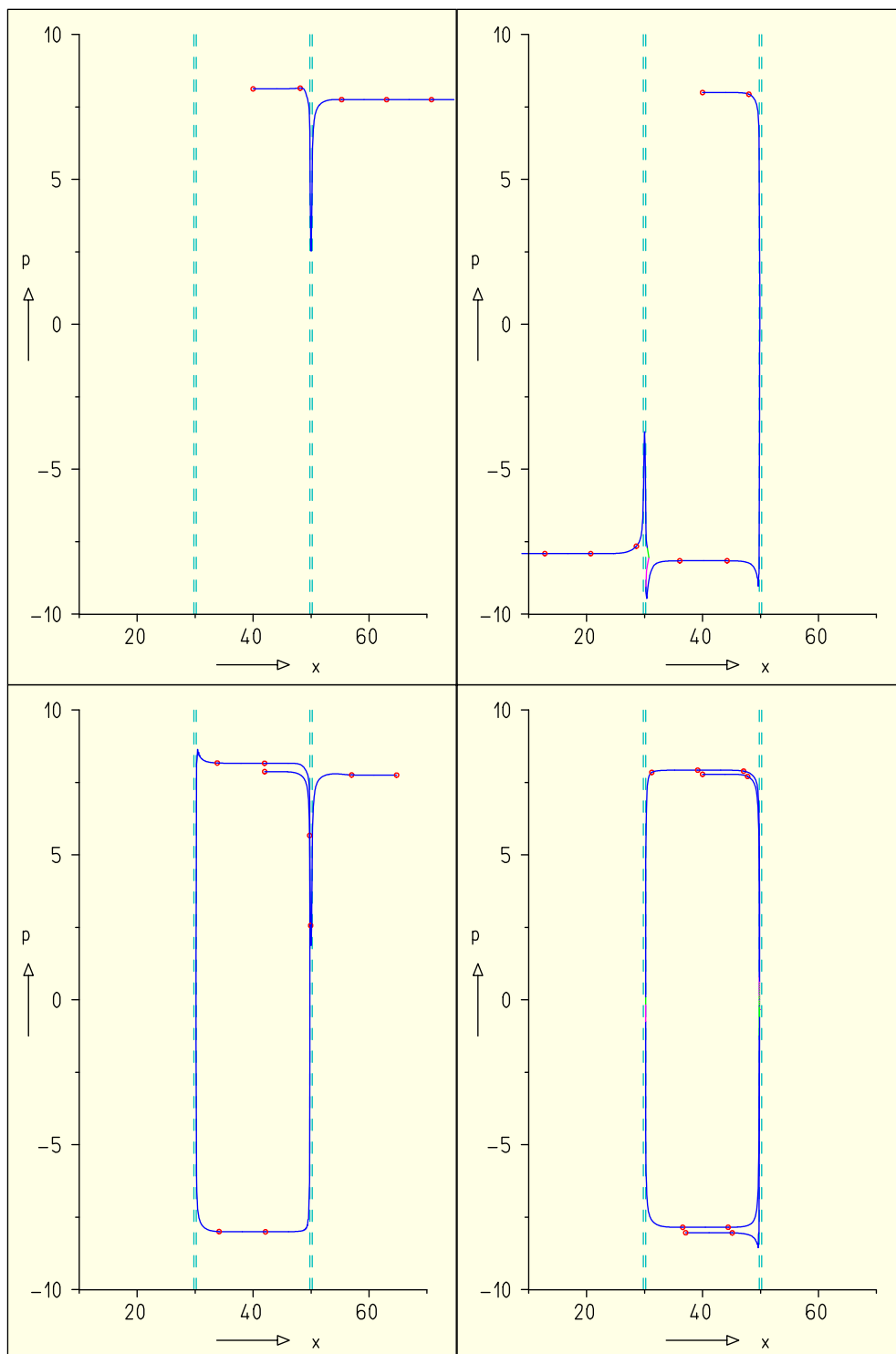


Abbildung 2.34: Ausgewählte Trajektorien für ein Wellenpaket innerhalb einer Doppelbarriere, vgl Bild 2.13. Nach der Reihenfolge: direkte Transmission, Transmission nach halbem und vollem Umlauf sowie eineinhalbfacher Umlauf.

menhängend sein, sie sind aber nicht sternförmig, sondern in der Mitte eher stark verzahnt.

In Bild 2.34 sind jeweils einzelne Trajektorien zur Wigner-Funktion aus Bild 2.13 gezeigt; das Wellenpaket befindet sich dort anfänglich innerhalb der Doppelbarriere. Da nur eineinhalb Umläufe innerhalb der Barrieren betrachtet werden, ist die Dispersion des Wellenpakets für diese Betrachtung vernachlässigbar. Das Verhalten einzelner Trajektorien an den Barrieren läßt sich damit weitgehend mit den Situationen an einer Einzelbarriere beschreiben. So findet man im ersten Teilbild eine durch eine einfache Transmission an der rechten Barriere beschreibbare Kurve. Im zweiten Teilbild erfolgt zuerst eine Reflexion an der rechten Barriere gefolgt von einer Transmission durch die linke. Dabei durchläuft die Kurve vor der linken Barriere einen wie zu Bild 2.29 näher betrachteten, charakteristischen negativen Bereich aus Bild 2.7. Bei der Kurve im dritten Teilbild finden rechts und links Reflexionen statt, wobei sich an der rechten Barriere eine Transmission wie aus Teilbild 1 anschließt. Im vierten Teilbild treten drei Reflexionen auf, so daß eineinhalb Umläufe innerhalb der Doppelbarriere stattfinden. Bei kleinen Impulsen werden dabei kleine negative Bereiche durchlaufen, die von verschiedenen Interferenzbereichen stammen, vgl. Bild 2.13.

2.12.3 Korrelierte Systeme

Wie wir in Abschnitt 2.12.2 sahen, können Trajektorien einerseits den Interferenzbereich verschiedener Teile eines Wellenpakets durchlaufen und andererseits in diesem verweilen oder (bei den betrachteten Zeiten) enden. Wir untersuchen nun die spezielle Situation von Eigenzuständen in separierten Potentialtöpfen aus Abschnitt 2.9.6. Um mögliche Durchgänge durch die Potentialbarriere festzustellen, werden Orte in der Barrierenmitte als Anfangsbedingungen für die Bahnkurven gewählt. Bild 2.35 zeigt Trajektorien mit solchen Anfangsorten für die Wigner-Funktionen aus Bild 2.15 – sie sind wie für alle Eigenzustände geschlossen. Einige Trajektorien verlaufen innerhalb der Barriere, andere treten aus ihr heraus, bleiben aber in ihrer Nähe. Wieder andere durchlaufen die Barriere und große Teile beider Potentialtöpfe. Diese befinden sich sogar im „klassischen“ Bereich der Einzeltöpfe, vgl. Bild 2.18. Eine Zeitumkehrung erfolgt hauptsächlich auf in der Barriere oder in deren Nähe verlaufenden Kurven. Ein Durchlauf durch negative Bereiche der Wigner-Funktion existiert z. T. auch für kurze Stücke der durch größere Bereiche der Einzeltöpfe verlaufenden Trajektorien. Der Interferenzterm überbrückt in diesem Fall die Barriere und verbindet die beiden räumlich getrennten Gebiete.

Zu der bestehenden Problematik des Durchgangs durch trennende Barrieren ist zu sagen: Das System selbst ist speziell gewählt – im Raum äußerer Parameter müssen einzelne Energieeigenwerte einander entsprechen, und das Gesamtsystem muß dasselbe Teilchen beschreiben. Bei Eigenzuständen erfolgt effektiv kein Transport, insbesondere nicht durch die Barriere. Das ist ggf. eine Frage

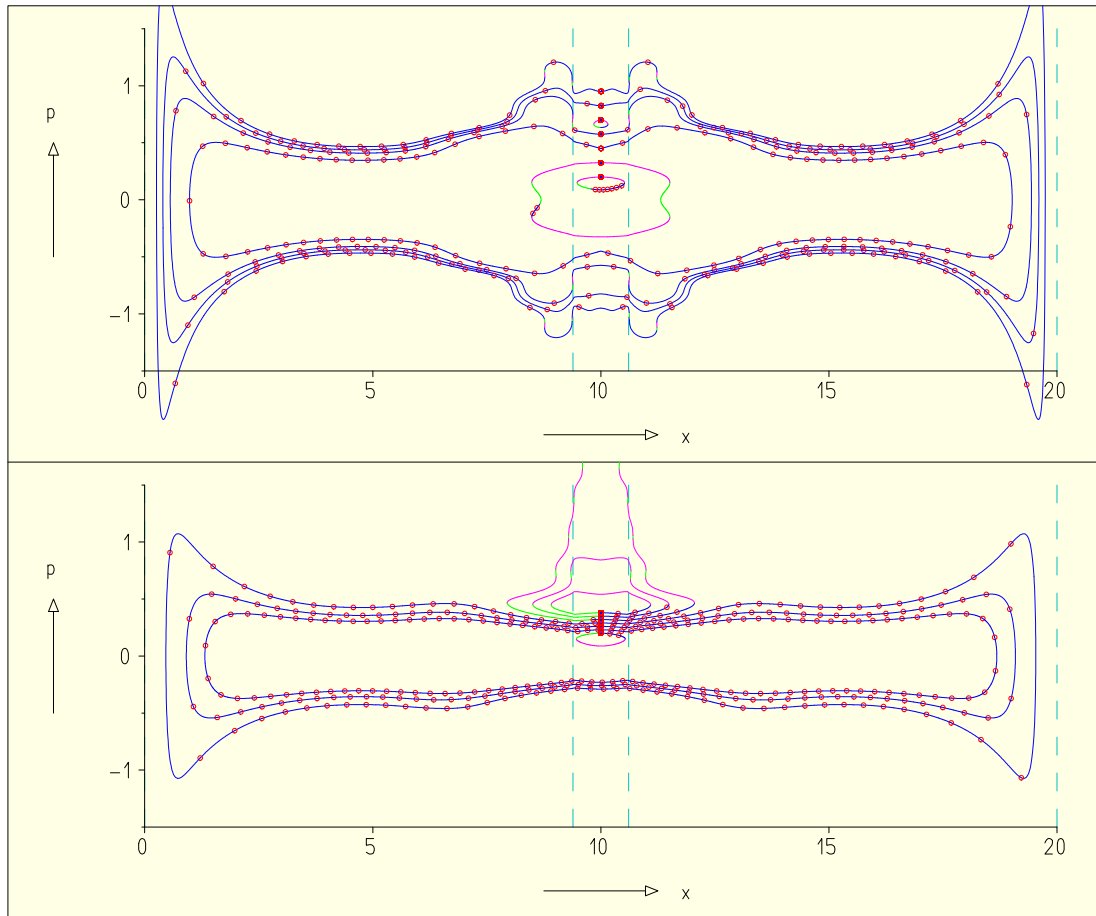


Abbildung 2.35: In der Barriere beginnende Trajektorien der Wigner-Funktionen eines symmetrisch geteilten tiefen Potentialtopfes aus Bild 2.15 für $n_{\text{ges}} = 1$ (oben) und $n_{\text{ges}} = 2$ (unten).

der Stromeichung, vgl. Abschnitt 2.8. Des weiteren zeigen Eigenzustände weniger Übereinstimmung mit einer klassischen Interpretation als Wellenpakete, vgl. auch Abschnitt 2.12.2.

2.13 Mehrdimensionale Verallgemeinerung

In Abschnitt 2.8 haben wir die Definition der Ströme J_x und J_p für den Phasenraum der eindimensionalen Quantenmechanik betrachtet. Für N_F Freiheitsgrade, vgl. Abschnitt 2.6, ist die Zeitentwicklung durch die entsprechende Wigner-Moyal-Gleichung aus [31] gegeben,

$$\begin{aligned}
-\frac{\partial}{\partial t}W &= \sum_{i=1}^{N_F} \frac{p_i}{m_i} \frac{\partial W}{\partial x_i} + \frac{i}{(2\pi\hbar)^{N_F}\hbar} \int \cdots \int dy_1 \cdots dy_{N_F} \\
&\times \left[V\left(x_1 + \frac{y_1}{2}, \dots, x_{N_F} + \frac{y_{N_F}}{2}\right) - V\left(x_1 - \frac{y_1}{2}, \dots, x_{N_F} - \frac{y_{N_F}}{2}\right) \right] \\
&\times \psi^*\left(x_1 + \frac{y_1}{2}, \dots, x_{N_F} + \frac{y_{N_F}}{2}\right) \psi\left(x_1 - \frac{y_1}{2}, \dots, x_{N_F} - \frac{y_{N_F}}{2}\right) e^{(i/\hbar) \sum_{k=1}^{N_F} p_k y_k} \quad .
\end{aligned} \tag{2.56}$$

Analytische Potentiale erlauben es wie in einer Dimension, den Potentialterm von (2.56) in einer Potenzreihe zu schreiben, siehe Gl. (2.56) aus [31],

$$- \sum_{\sum_i \lambda_i \text{ ungerade}} \frac{\partial^{\lambda_1 + \cdots + \lambda_{N_F}} V}{\partial x_1^{\lambda_1} \cdots \partial x_{N_F}^{\lambda_{N_F}}} \frac{(\hbar/2i)^{\lambda_1 + \cdots + \lambda_{N_F} - 1}}{\lambda_1! \cdots \lambda_{N_F}!} \frac{\partial^{\lambda_1 + \cdots + \lambda_{N_F}} W}{\partial p_1^{\lambda_1} \cdots \partial p_{N_F}^{\lambda_{N_F}}} \quad .$$

Wie in einer Dimension kann verallgemeinernd für J_{x_k} der Ansatz

$$J_{x_k} := \frac{p_k}{m_k} W$$

gemacht werden. Im Potentialterm treten verschiedene Potenzen gemischter Ableitungen nach Ortskoordinaten auf, welche daher nicht separierbar sind. Es besteht daher eine größere Freiheit bei der Definition der Impulsstromdichten J_{p_k} . Man kann allgemein den Ausdruck

$$\begin{aligned}
J_{p_k} &:= -\hbar \sum_{\sum_i \lambda_i \text{ ungerade}} P_k(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_F}) \\
&\times \frac{\partial^{\lambda_1 + \cdots + \lambda_{N_F}} V}{\partial x_1^{\lambda_1} \cdots \partial x_{N_F}^{\lambda_{N_F}}} \frac{(\hbar/2i)^{\lambda_1 + \cdots + \lambda_{N_F} - 1}}{\lambda_1! \cdots \lambda_{N_F}!} \frac{\partial^{\lambda_1 + \cdots + \lambda_{N_F} - 1} W}{\partial p_1^{\lambda_1} \cdots \partial p_k^{\lambda_k - 1} \cdots \partial p_{N_F}^{\lambda_{N_F}}}
\end{aligned}$$

ansetzen, wobei die Koeffizienten $P_k(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_F})$ die Bedingungen

$$P_k(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_F}) = 0 \quad \text{für} \quad \lambda_k = 0 \quad , \quad \sum_k P_k(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_F}) = 1$$

erfüllen sollten. Es sind solche P_k zu bevorzugen, die neben der Existenz des klassischen Grenzwertes eine formale Symmetrie bezüglich der Koordinaten aufweisen. Eine mögliche Wahl ist z. B.

$$P_k(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_F}) = \frac{\lambda_k}{\lambda_1 + \cdots + \lambda_{N_F}} \quad .$$

Mit den so definierten Stromdichten schreibt sich (2.56) als Kontinuitätsgleichung,

$$-\frac{\partial W}{\partial t} = \sum_{k=1}^{N_F} \frac{\partial J_{x_k}}{\partial x_k} + \sum_{k=1}^{N_F} \frac{\partial J_{p_k}}{\partial p_k} \quad .$$

Entsprechend Abschnitt 2.10 lauten die Bewegungsgleichungen für die Stromtrajektorien

$$\dot{x}_k = \frac{J_{x_k}}{W} = \frac{p_k}{m_k} \quad , \quad \dot{p}_k = \frac{J_{p_k}}{W} \quad .$$

2.14 Alternative Ansätze

Neben der hier betrachteten Wigner-Verteilung und deren Transport im Phasenraum unter der Zeitentwicklung können ebenso andere Phasenraumverteilungen betrachtet werden. Insbesondere findet die Husimi-Funktion verbreitete Anwendung [42], die aus der Phasenraum-Integration der Wigner-Verteilung mit der Wigner-Verteilung eines kohärenten Zustands oder, alternativ, aus dem Betragsquadrat der Projektion der Wellenfunktion auf die eines kohärenten (oder gequetschten) Zustands entsteht. Die Vorteile dieser Wahl sind die Nichtnegativität der Funktion – eine Interpretation als (Quasi-)Wahrscheinlichkeitsdichte ist so möglich – und die geringere Variabilität der Funktionswerte, besonders bei der Untersuchung klassisch chaotischer Systeme [42]. Andererseits werden mit der Breite und ggf. der Korrelation ein oder zwei willkürliche Parameter eingeführt, die abhängig von der gewünschten (d. h. entsprechend zu betonenden) Information geeignet gewählt werden müssen. Zusätzlich ergeben sich die Orts- und Impuls-Verteilungen nicht mehr als Randverteilungen der Phasenraumfunktion, vgl. (2.19) und (2.20). Auf dieser Grundlage kann (mit fixierten Parametern) über die kausale Zeitentwicklung der nichtnegativen Phasenraumdichte eine Formulierung in Analogie zur Hydrodynamik angegeben werden [54]. Im Rahmen des hydrodynamischen Bildes wurde beispielsweise das quantenmechanische Verhalten eines periodisch angestoßenen starren Rotors durch die Darstellung mit kohärenten Zuständen im zylindrischen Phasenraum im Vergleich zur klassischen Formulierung diskutiert [59].

Mittels einer Projektion auf einen vollständigen orthonormalen Satz von komplexwertigen Funktionen im Phasenraum, die z. B. durch kohärente Zustände repräsentiert werden können, gelangt man formal zu einer Art Schrödinger-Gleichung [64, 65, 49]. Ort und Impuls werden durch Operatoren ersetzt, die jeweils Ableitungen nach der anderen, konjugierten Variable enthalten, womit die Schrödinger-Gleichung im allgemeinen eine partielle Differentialgleichung von beliebig hoher Ordnung darstellt. Die Lösungsgesamtheit ist daher gegenüber der der gängigen Ortsraumdarstellung vergrößert; bei den angegebenen Lösungen orientiert man sich an denen im Ortsraum. Zwischen reinen Zuständen kann ein Skalarprodukt gebildet werden, und dessen Betragsquadrat bzw. allgemein das diagonale Matrixelement der Dichtematrix entspricht (z. B.) der durch die Husimi-Funktion beschriebenen Phasenraumdichte [65]. Für stationäre Zustände sind bestimmte Phasenraumfunktionen, allgemein sogenannte s -geordnete Wigner-Funktionen, die sich durch eine asymmetrische Argumentverschiebung in (2.18) bzw. durch bestimmte Funktionen f in (2.25) ergeben, wobei die übliche Wigner-Funktion (2.18) mit $f = 1$ durch $s = 0$ gegeben ist, bei entsprechender Wahl der Operatoren durch zwei Schrödinger-Gleichungen obiger Art eindeutig festgelegt [11].

Im Rahmen der Beschreibung der Zeitentwicklung einer quantenmechanischen Phasenraumfunktion wurde versucht, die Bewegung analog zu klassischen Pha-

senraum-Trajektorien zu formulieren: In [43] wurden für die Wigner-Funktion, ausgehend von der Wigner–Moyal-Gleichung (2.26), die quantenmechanischen Korrekturterme zu den klassischen Bewegungsgleichungen zu einem effektiven Potential zusammengefaßt, wobei die Bewegung mittels der klassischen Bewegungsgleichungen beschrieben wurde („Wigner-Trajektorien“ x^W, p^W):

$$\frac{\partial V_{\text{eff}}^W(x, p, t)}{\partial x} = \frac{\frac{\partial}{\partial t}W(x, p, t) + \frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial x}W(x, p, t)}{\frac{\partial}{\partial p}W(x, p, t)},$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx^W}{dt} &= \frac{p^W}{m}, & \frac{dp^W}{dt} &= -\frac{\partial V_{\text{eff}}^W(x, p, t)}{\partial x} \end{aligned} \right|_{\substack{x=x^W \\ p=p^W}}.$$

Mit diesem Ansatz wurde das Verhalten physikalischer Systeme untersucht, z. B. in [43, 44, 29, 50, 42]. Dieser Ansatz kann aufgrund der Ausbildung negativer Bereiche der Wigner-Funktion nicht allgemeingültig sein [51], sondern nur bei kleinen Abweichungen des Potentials von der quadratischen Form in den Koordinaten eine Verbesserung gegenüber der klassischen Beschreibung liefern [42].

In [51] wurden zusätzlich sogenannte Weyl-Trajektorien betrachtet, die als Weyl-Transformierte der Operatoren für Ort und Impuls im Heisenberg-Bild definiert sind. Diese sind bezüglich ihrer physikalischen Interpretation von begrenztem Nutzen: Sie sind zwar zustandsunabhängig, dafür aber basisabhängig, und Mittelwerte von Produkten lassen sich mit ihnen nicht, z. B. im Gegensatz zu „Wigner-Trajektorien“ im Rahmen ihrer Gültigkeit, auf die Anfangsverteilung zurückführen. Weitere Trajektorien bezüglich der Wigner-Funktion, die im Rahmen ihrer Anwendung auf den harmonischen Oszillator mit den klassischen Trajektorien identisch sind, wurden im Zusammenhang mit der feldtheoretischen Wigner-Funktional-Formulierung diskutiert [14].

Auf der Grundlage positiv definiter Dichten lassen sich im Phasenraum in einfacherer Weise Trajektorien definieren. So wurden im Rahmen der Husimi-Funktion bzw. der Darstellung durch kohärente Zustände solche Bahnkurven betrachtet. In der hydrodynamischen Interpretation werden diese im Sinne von Strömungslinien interpretiert [54]. Untersucht wurden z. B. Trajektorien für den harmonischen Oszillator [65] wie auch das freie Teilchen, ein Teilchen im Kasten (ohne Beachtung der Randbedingungen) wie das quadratische Potential mit beiden Vorzeichen [49] oder den doppelten Potentialtopf eines quartischen Oszillators [54]. Für Phasenraumfunktionen verschieden von der Wigner-Funktion sind die Trajektorien z. B. bereits für den kräftefreien Fall i. a. nicht mehr mit den klassischen Trajektorien identisch sondern von komplizierterer Struktur [42]. Darüber hinaus besitzen die Ströme im Phasenraum die übliche Eichfreiheit, vgl. Abschnitt 2.8, die durch zusätzliche Bedingungen zu fixieren ist [54, 49].

Die quantenmechanische Phasenraumdynamik wurde hier auch deshalb betrachtet, weil sie (z. B. in einer Dimension des Konfigurationsraums) durch die Vorgabe von Ort x und Impuls p eine zweiwertige (d. h. i. a. mehrwertige) Dynamik darstellt im Gegensatz zur Bohmschen Interpretation, die wegen $p = \partial S / \partial x$

mit der ausschließlichen Vorgabe des (Anfangs-)Ortes x eine einwertige Theorie ist. Andererseits ist es möglich, die Ortsraumdicke zusammen mit der Nebenbedingung $p = \partial S/\partial x$ für den Impuls als f -Quasiverteilung (2.25) zu formulieren, indem f als zustandsabhängige Funktion definiert wird [18]:

$$f_{\text{B}}(\xi, \eta, t) = \frac{\int du |\psi(u, t)|^2 \exp\left(i\eta \frac{\partial}{\partial u} S(u, t) + i\xi u\right)}{\int dv \psi^*(v - \frac{\hbar}{2}\eta, t) \psi(v + \frac{\hbar}{2}\eta, t) e^{i\xi v}} .$$

Die daraus resultierende f -Quasiverteilung lautet

$$F^{f_{\text{B}}}(x, p, t) = |\psi(x, t)|^2 \delta\left(p - \frac{\partial S(x, t)}{\partial x}\right) .$$

Andererseits kann jede f -Quasiverteilung (und damit insbesondere die Wigner-Verteilung) aus der Vorgabe von $|\psi(x, t)|$ und $S(x, t)$ als auf dem Phasenraum definierte Funktionen konstruiert werden [19].

In Abschnitt 2.12.2 werden in den Bildern 2.30, 2.32 und 2.33 die Startpunkte der Stromtrajektorien für die Streuung eines anfänglich gaußschen Wellenpakets an einer repulsiven sowie einer attraktiven Einfach- und einer repulsiven Doppelbarriere betrachtet. Bei vergleichbaren Transmissionswahrscheinlichkeiten bei den Einfachbarrieren liegen die Gebiete ähnlich, aus denen die transmittierten Trajektorien stammen, indem vornehmlich hohe Impulse aber auch etwas die hinteren Teile der Anfangsverteilung bevorzugt werden. In [52] wurde mit Hilfe eines Einflußfunktionals \mathcal{F} untersucht, inwieweit und welche Teile einer Anfangswahrscheinlichkeitsdichte $P(q, t_0)$ zu der Wahrscheinlichkeitsdichte $P(q, t)$ an einem späteren Zeitpunkt t beitragen,

$$P(q, t) = \int \mathcal{F}(q, t; q_0, t_0) P(q_0, t_0) dq_0 .$$

Die Bestimmung von \mathcal{F} erfolgt mit Hilfe der Wigner-Funktion. Da es sich beim Einflußfunktional um eine Beziehung zwischen Wahrscheinlichkeitsdichten handelt, d. h. die Phaseninformation der Wellenfunktion außer Betracht gelassen wird, wird \mathcal{F} jeweils für eine Menge von Wellen- bzw. Wigner-Funktionen mit gleicher Impulsverteilung bestimmt. Es werden die freie Propagation und das Tunneln durch eine einfache Barriere betrachtet. Dabei stellt sich z. B. heraus, daß für das Maximum des getunnelten Teilwellenpakets bei unkorrelierter Anfangswellenfunktion weder vorderer noch hinterer Teil dieser einen signifikant größeren Einfluß auf den betrachteten Punkt hat. Das Gewicht verschiebt sich in der Zeitentwicklung zum vorderen Teil hin durch die Ausbildung von Orts-Impuls-Korrelationen bei freier Bewegung.

Anhang A

Quantenmechanische Dichten und Ströme. Erhaltungsgrößen

A.1 Lagrange-Dichte und Energieerhaltung

Die nichtrelativistische Quantenmechanik wird durch die Schrödinger-Gleichung bestimmt, die in drei Dimensionen die Form

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V\psi \quad (\text{A.1})$$

besitzt. In einer Dimension ist die Lagrange-Dichte durch den Ausdruck

$$\mathcal{L}_{\text{as}} = -i\hbar \dot{\psi}^* \psi - V\psi^* \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \psi^{*\prime} \psi'$$

gegeben [21]. (Der dreidimensionale Ausdruck ergibt sich durch die Ersetzung der Ortsableitung durch den Gradienten, und Produkte solcher Ableitungen führen auf Skalarprodukte dieser.) Durch Umeichung mittels der totalen Zeitableitung von $\psi^* \psi$ erhält man eine symmetrische Form der Lagrange-Dichte, vgl. [32],

$$\mathcal{L} = \frac{i\hbar}{2} (\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi}^* \psi) - V\psi^* \psi - \frac{\hbar^2}{2m} \psi^{*\prime} \psi' .$$

Die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit ergibt sich aus der Invarianz der Lagrange-Dichte unter globaler Phasentransformation mit dem Noether-Theorem [21].

Ist das Potential zeitunabhängig, so führt eine zur Schrödinger-Gleichung gehörende Energiedichte ε zu einer Erhaltungsgröße:

$$\frac{\partial V}{\partial t} = 0 \quad , \quad \varepsilon = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \dot{\psi} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} \dot{\psi}^* - \mathcal{L} = \frac{\hbar^2}{2m} \psi^{*\prime} \psi' + V\psi^* \psi \quad ;$$

die Erhaltungsgröße ergibt sich aus der Ortsintegration von ε und stellt die Gesamtenergie dar, die durch die Wellenfunktion beschrieben wird. Zur Energiedichte gibt es die zugehörige Energiestromdichte

$$\pi_\epsilon = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi'} \dot{\psi} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi'^*} \dot{\psi}^* = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi'^* \dot{\psi} + \dot{\psi}' \psi^*) \quad ,$$

mit der ϵ eine Kontinuitätsgleichung erfüllt. Eine Verallgemeinerung dieser für zeitabhängige Potentiale wird in Abschnitt A.2 betrachtet.

Entsprechend der Energiedichte lautet die Impulsdichte eines Zustandes ψ

$$\pi = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \dot{\psi}' - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^*} \dot{\psi}'^* = \frac{\hbar}{2i} (\psi^* \dot{\psi}' - \dot{\psi}'^* \psi) = m \vec{j} \quad . \quad (\text{A.2})$$

Sie ist damit die mit der Masse m multiplizierte Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j} . Der Spannungstensor wird in Abschnitt A.3 betrachtet.

In mehreren Dimensionen kann die Wahrscheinlichkeitsstromdichte \vec{j} , wie in [54] beschrieben und von Messiah [47] bemerkt, nicht eindeutig definiert werden, weil diese letztlich über die Kontinuitätsgleichung, d. h. ihre Divergenz bestimmt wird. Das Problem liegt dabei in der Operatorordnung der Quantenmechanik. Ähnliche Mehrdeutigkeiten treten auch bei den im folgenden definierten Energiestromdichten auf, zusätzlich zur Mehrdeutigkeit der Energiedichte selbst. Auswahlkriterien oder Einschränkungen können in diesem Zusammenhang die Invarianzeigenschaften der definierten Stromdichten z. B. unter Galilei-Transformationen sein [54] und/oder die Simplizität der betrachteten Ausdrücke. In [17] werden mögliche Alternativen zur Bohmschen Mechanik betrachtet über eine Modifikation des Geschwindigkeitsfeldes $\vec{v} = \vec{j}/\rho$ des Bohmschen Falles unter verschiedenen Invarianzforderungen. Diese Alternativen können umgekehrt als Modifikation der Stromdichte \vec{j} interpretiert werden.

A.2 Energiedichten und Kontinuitätsgleichung

Wir betrachten zunächst die aus der Lagrange-Dichte folgende Energiedichte in drei Dimensionen und nennen sie Energiedichte 1 (ϵ_1):

$$\epsilon_1 := \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla} \psi^*) \cdot (\vec{\nabla} \psi) + V \psi^* \psi \quad . \quad (\text{A.3})$$

Für diese läßt sich ein hermitescher Energiedichteoperator ϵ_1 bilden,

$$\epsilon_1 = \frac{1}{2m} \vec{p} |\psi(t)\rangle \cdot \langle \psi(t)| \vec{p} + \frac{V}{2} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \frac{V}{2} \quad , \quad \epsilon_1 = \langle \vec{x} | \epsilon_1 | \vec{x} \rangle \quad .$$

Entsprechend wird die Impulsdichte behandelt, vgl. (A.2),

$$\vec{\pi} := m \vec{j} = \frac{\hbar}{2i} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \quad , \quad (\text{A.4})$$

für die ebenfalls ein hermitescher Operator definiert wird,

$$\vec{\pi} = \frac{1}{2} (\vec{p} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \vec{p}) \quad , \quad \vec{\pi} = \langle \vec{x} | \vec{\pi} | \vec{x} \rangle \quad .$$

Als nächstes bilden wir die Zeitableitung von ε_1 , wobei die Zeitableitungen der Wellenfunktionen mittels der Schrödinger-Gleichung (A.1) ersetzt werden,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varepsilon_1}{\partial t} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\vec{\nabla} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \cdot (\vec{\nabla} \psi) + (\vec{\nabla} \psi^*) \cdot \left(\vec{\nabla} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \right] + V \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + V \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial V}{\partial t} \psi^* \psi \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left[\vec{\nabla} \left(-\frac{\hbar i}{2m} \Delta \psi^* + \frac{i}{\hbar} V \psi^* \right) \right] \cdot (\vec{\nabla} \psi) + (\vec{\nabla} \psi^*) \cdot \left[\vec{\nabla} \left(\frac{\hbar i}{2m} \Delta \psi - \frac{i}{\hbar} V \psi \right) \right] \right\} \\ &\quad + V \left(-\frac{\hbar i}{2m} \Delta \psi^* + \frac{i}{\hbar} V \psi^* \right) \psi + V \psi^* \left(\frac{\hbar i}{2m} \Delta \psi - \frac{i}{\hbar} V \psi \right) + \frac{\partial V}{\partial t} \psi^* \psi \\ &= \frac{\hbar i}{2m} \left\{ \left[\vec{\nabla} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* \right) \right] \cdot (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^*) \cdot \left[\vec{\nabla} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \right) \right] \right. \\ &\quad \left. + (\vec{\nabla} V) \cdot [\psi^* (\vec{\nabla} \psi) - \psi (\vec{\nabla} \psi^*)] - V [(\Delta \psi^*) \psi - \psi^* (\Delta \psi)] \right\} + \frac{\partial V}{\partial t} \psi^* \psi \quad . \end{aligned}$$

Die zugehörige Stromdichte wird hier Energiestromdichte 1 ($\vec{\pi}_{\varepsilon_1}$) genannt:

$$\begin{aligned} \vec{\pi}_{\varepsilon_1} &:= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[(\vec{\nabla} \psi^*) \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) (\vec{\nabla} \psi) \right] \\ &= \frac{\hbar i}{2m} \left[(\vec{\nabla} \psi^*) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi \right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + V \psi^* \right) (\vec{\nabla} \psi) \right] \quad . \quad (\text{A.5}) \end{aligned}$$

An dieser Stelle wurden ebenfalls die Zeitableitungen mittels der Bewegungsgleichungen ersetzt. Der hermitesche Operator zur Energiestromdichte 1 hat die Form

$$\vec{\pi}_{\varepsilon_1} = \frac{1}{2m} (\vec{p} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| H + H |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \vec{p}) \quad , \quad \vec{\pi}_{\varepsilon_1} = \langle \vec{x} | \vec{\pi}_{\varepsilon_1} | \vec{x} \rangle \quad .$$

Die Divergenz von $\vec{\pi}_{\varepsilon_1}$ schreibt sich somit als

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{\pi}_{\varepsilon_1} &= \\ &= \frac{\hbar i}{2m} \left\{ (\Delta \psi^*) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi \right) + (\vec{\nabla} \psi^*) \cdot \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \Delta \psi + V (\vec{\nabla} \psi) + (\vec{\nabla} V) \psi \right] \right. \\ &\quad \left. - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + V \psi^* \right) (\Delta \psi) - \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \Delta \psi^* + V (\vec{\nabla} \psi^*) + (\vec{\nabla} V) \psi^* \right] \cdot (\vec{\nabla} \psi) \right\} \\ &= \frac{\hbar i}{2m} \left\{ (\vec{\nabla} \psi^*) \cdot \left[\vec{\nabla} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \right) \right] - \left[\vec{\nabla} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* \right) \right] \cdot (\vec{\nabla} \psi) \right. \\ &\quad \left. + V [(\Delta \psi^*) \psi - \psi^* (\Delta \psi)] - (\vec{\nabla} V) \cdot [\psi^* (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi] \right\} \quad . \end{aligned}$$

Ein Vergleich mit der Zeitableitung von ε_1 führt auf eine Kontinuitätsgleichung mit Inhomogenität, vgl. [32],

$$\frac{\partial \varepsilon_1}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\pi}_{\varepsilon_1} = \frac{\partial V}{\partial t} \psi^* \psi \quad . \quad (\text{A.6})$$

Diese Inhomogenität ist die Dichte der Energieänderung des durch die Wellenfunktion beschriebenen Zustands. Sie ist einfach die zeitliche Potentialänderung gewichtet mit der Wahrscheinlichkeitsdichte, so daß die gesamte Energieänderung dem Erwartungswert der zeitlichen Potentialänderung entspricht.

Neben Energiedichte 1 kann man eine zweite Dichte definieren mit indefinitem kinetischen Anteil. (Diese geht aus der ersten durch symmetrische partielle Integration der Energie hervor.) Sie wird hier Energiedichte 2 (ε_2) genannt,

$$\varepsilon_2 := -\frac{\hbar^2}{4m} (\psi^* (\Delta \psi) + (\Delta \psi^*) \psi) + V \psi^* \psi = \frac{i\hbar}{2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \quad , \quad (\text{A.7})$$

und der zugehörige Operator lautet

$$\varepsilon_2 = \frac{1}{2} (H |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| H) \quad , \quad \varepsilon_2 = \langle \vec{x} | \varepsilon_2 | \vec{x} \rangle \quad .$$

Die dazu passende Energiestromdichte $\vec{\pi}_{\varepsilon_2}$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \vec{\pi}_{\varepsilon_2} &= \frac{\hbar i}{2m} \left[\frac{\hbar^2}{4m} (\psi^* (\vec{\nabla} \Delta \psi) - (\vec{\nabla} \psi^*) (\Delta \psi) + (\Delta \psi^*) (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \Delta \psi^*) \psi) \right. \\ &\quad \left. - V (\psi^* (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi) \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{4m} \left[(\vec{\nabla} \psi^*) \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + (\vec{\nabla} \psi) \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) - \psi^* \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \psi \right) - \psi \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \psi^* \right) \right] \quad , \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

und der entsprechende Operator schreibt sich

$$\begin{aligned} \vec{\pi}_{\varepsilon_2} &= \frac{1}{4m} (\vec{p} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| H + H |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \vec{p} \\ &\quad + \vec{p} H |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| H \vec{p}) \quad , \quad \vec{\pi}_{\varepsilon_2} = \langle \vec{x} | \vec{\pi}_{\varepsilon_2} | \vec{x} \rangle \quad . \end{aligned}$$

Die Dichten ε_2 und $\vec{\pi}_{\varepsilon_2}$ erfüllen dieselbe erweiterte Kontinuitätsgleichung (A.6) wie ε_1 und $\vec{\pi}_{\varepsilon_1}$. Eine allgemeine Dichte kann damit als (normierte) Linearkombination der beiden Dichten formuliert werden, vgl. Abschnitt A.2.1.

A.2.1 Indefinitheit der Energiedichte

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi^* \psi$ ist positiv definit. Man kann die Frage stellen, welche Dichten der Schrödinger-Gleichung unter welchen Umständen ebenfalls

positiv definit sind. Für die Stromdichte j in einer Dimension können auch bei einseitigem Impulsspektrum negative Bereiche auftreten, vgl. [60].

Wir betrachten hier eine Linearkombination der Energiedichten ε_1 und ε_2 der Form ($0 \leq P \leq 1$)

$$\begin{aligned}\varepsilon &= (1 - P)\varepsilon_1 + P\varepsilon_2 \\ &= (1 - P)\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla}\psi^*) \cdot (\vec{\nabla}\psi) + P\left[-\frac{\hbar^2}{4m}(\psi^*(\Delta\psi) + (\Delta\psi^*)\psi)\right] + V\psi^*\psi \quad .\end{aligned}$$

Der Einfachheit halber beschränken wir uns auf eine Dimension und betrachten wie in [60] eine Superposition zweier Streuzustände mit den Wellenzahlen k_1 und k_2 :

$$\psi = N\left(e^{ik_1x} + \alpha e^{ik_2x}\right) \quad .$$

Mit den Ortsableitungen

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = iN\left(k_1 e^{ik_1x} + \alpha k_2 e^{ik_2x}\right) \quad , \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -N\left(k_1^2 e^{ik_1x} + \alpha k_2^2 e^{ik_2x}\right)$$

erhält man direkt einen Ausdruck für die Energiedichte:

$$\begin{aligned}\frac{\varepsilon}{N^2} &= \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + V + \alpha^2 \left(\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + V\right) \\ &\quad + \alpha \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(2(1 - P)k_1 k_2 + P(k_1^2 + k_2^2)\right) + 2V\right] \cos(k_1 - k_2)x \quad .\end{aligned}$$

Diese Größe wird für $\cos(k_1 - k_2)x = \pm 1$ räumlich extremal, das Minimum

$$\frac{\varepsilon_{x,\min}}{N^2} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + V + \alpha^2 \left(\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + V\right) \mp \alpha \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(2(1 - P)k_1 k_2 + P(k_1^2 + k_2^2)\right) + 2V\right]$$

wird angenommen bei negativem (oberen) Vorzeichen für $\alpha \geq 0$ und positivem (unteren) Vorzeichen für $\alpha < 0$. Das Minimum von $\varepsilon_{x,\min}$ bezüglich α ist gegeben durch

$$\frac{\partial\varepsilon_{x,\min}}{\partial\alpha} = 0 \quad \rightarrow \quad \alpha = \pm \frac{\frac{\hbar^2}{4m} \left(2(1 - P)k_1 k_2 + P(k_1^2 + k_2^2)\right) + V}{\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + V}$$

mit der obigen Vorzeichenkonvention, und man erhält als Minimum bezüglich x und α

$$\begin{aligned}\frac{\varepsilon_{x,\alpha,\min}}{N^2} &= \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} + V - \frac{\left[\frac{\hbar^2}{4m} \left(2(1 - P)k_1 k_2 + P(k_1^2 + k_2^2)\right) + V\right]^2}{\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + V} \\ &= \frac{\hbar^2 (k_1 - k_2)^2}{\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + V} \left[(1 - P)V - \frac{\hbar^2}{2m} P \left(k_1 k_2 + \frac{P}{2} (k_1 - k_2)^2 \right) \right] \quad .\end{aligned}$$

Für $P = 1$ ist das Minimum negativ. Im Fall $0 \leq P < 1$ hängt es vom Wert V des Potentials ab, ob das Minimum negativ ist oder nicht. Man kann also mit einer positiven Energiedichte (z. B. mit $V = 0$) in einer Zeitentwicklung beginnen und beim Eintritt in ein negatives Potential negative Beiträge zur Energiedichte erhalten. Damit ist die Positivität der Energiedichte nur bei nichtnegativen Potentialen gewährleistet. Bei endlich tiefen Potentialen könnte man die Energiedichte zwar durch Addition eines Vielfachen der Wahrscheinlichkeitsdichte umeichen, bei singulären Potentialen versagt aber auch diese Methode.

A.2.2 Energiedichte als Randverteilung der Wigner-Verteilung

Mit der Wigner-Verteilung (2.18) ergibt sich die Ortsverteilung einer physikalischen Größe als Impulsintegral der Wigner-Funktion eines Zustandes mit dem Weyl-transformierten Operator der Observablen. Im Fall der kinetischen Energie kann der klassische Ausdruck $p^2/(2m)$ verwendet werden. Die Rechnung erfolgt in einer Dimension, die Terme für weitere Dimensionen sind additiv. Es gilt

$$\begin{aligned}
\varepsilon_W^{\text{kin}}(t, x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m} W(x, p, t) dp \\
&= \frac{1}{4\pi m \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp p^2 \int_{-\infty}^{\infty} dy \psi^*(x + \frac{y}{2}, t) \psi(x - \frac{y}{2}, t) e^{ipy/\hbar} \\
&= \frac{1}{4\pi m \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dy \psi^*(x + \frac{y}{2}, t) \psi(x - \frac{y}{2}, t) \int_{-\infty}^{\infty} dp p^2 e^{ipy/\hbar} \\
&= \frac{1}{4\pi m \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dy \psi^*(x + \frac{y}{2}, t) \psi(x - \frac{y}{2}, t) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ipy/\hbar} \\
&= -\frac{\hbar}{4\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} dy \psi^*(x + \frac{y}{2}, t) \psi(x - \frac{y}{2}, t) \frac{\partial^2}{\partial y^2} 2\pi \delta(y/\hbar) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dy \delta(y) \frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\psi^*(x + \frac{y}{2}, t) \psi(x - \frac{y}{2}, t) \right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dy \delta(y) \left(\frac{1}{4} \psi^{*''}(x + \frac{y}{2}, t) \psi(x - \frac{y}{2}, t) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{2} \psi^{*'}(x + \frac{y}{2}, t) \psi'(x - \frac{y}{2}, t) + \frac{1}{4} \psi^*(x + \frac{y}{2}, t) \psi''(x - \frac{y}{2}, t) \right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{8m} \left(\psi^{*''}(x, t) \psi(x, t) - 2\psi^{*'}(x, t) \psi'(x, t) + \psi^*(x, t) \psi''(x, t) \right) \quad .
\end{aligned}$$

Der dreidimensionale Ausdruck für die kinetische Energiedichte lautet

$$\varepsilon_W^{\text{kin}}(t, \vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{8m} \left((\Delta \psi^*) \psi - 2(\vec{\nabla} \psi^*) \cdot (\vec{\nabla} \psi) + \psi^* (\Delta \psi) \right) \quad .$$

Ein Vergleich mit den Energiedichten 1 und 2 aus dem ersten Teil von Abschnitt A.2 zeigt, daß $\varepsilon_W^{\text{kin}}(t, \vec{r})$ als arithmetisches Mittel dieser beiden Größen geschrieben

werden kann, d. h. $P = 1/2$ in Abschnitt A.2.1,

$$\varepsilon_W^{\text{kin}}(t, \vec{r}) = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_1^{\text{kin}}(t, \vec{r}) + \varepsilon_2^{\text{kin}}(t, \vec{r}) \right) \quad .$$

Die potentielle Energie geht in ε_1 und ε_2 in gleicher Weise ein, so daß diese Aussage auch für die genannten Gesamtenergien gilt.

A.3 Weitere dynamische Analogien zur Mechanik

Neben den bereits betrachteten Elementen wie Energiedichte, Energiestromdichte und Impulsdichte verbleibt der Spannungstensor als Teil des Energie-Impulstensors. Die kanonische Darstellung seiner Elemente folgt aus der Lagrange-Dichte und der Schrödinger-Gleichung, vgl. Abschnitt A.1 und [32],

$$\begin{aligned} T_{ij}^{(\pi)} &= -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \psi)} \partial_j \psi - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \psi^*)} \partial_j \psi^* + \delta_{ij} \mathcal{L} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} (\partial_i \psi^*) (\partial_j \psi) + \frac{\hbar^2}{2m} (\partial_i \psi) (\partial_j \psi^*) \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{4m} \left(\psi^* (\Delta \psi) + (\Delta \psi^*) \psi + 2(\vec{\nabla} \psi^*) \cdot (\vec{\nabla} \psi) \right) \delta_{ij} \quad . \end{aligned}$$

Damit schreibt er sich in der Form

$$\begin{aligned} \underline{\underline{T}}_{\pi} &= \frac{\hbar^2}{4m} \left(2(\vec{\nabla} \psi^*) \otimes (\vec{\nabla} \psi) + 2(\vec{\nabla} \psi) \otimes (\vec{\nabla} \psi^*) \right. \\ &\quad \left. - \left(\psi^* (\Delta \psi) + (\Delta \psi^*) \psi + 2(\vec{\nabla} \psi^*) \cdot (\vec{\nabla} \psi) \right) \underline{\underline{1}} \right) \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Er besitzt als Operator die Darstellung

$$\begin{aligned} \underline{\underline{T}}_{\pi} &= \frac{1}{4m} \left(2(\vec{p} |\psi(t)\rangle \otimes \langle \psi(t) | \vec{p})^T + 2\vec{p} |\psi(t)\rangle \otimes \langle \psi(t) | \vec{p} \right. \\ &\quad \left. + (|\psi(t)\rangle \langle \psi(t) | \vec{p}^2 + \vec{p}^2 |\psi(t)\rangle \langle \psi(t) | - 2\vec{p} |\psi(t)\rangle \cdot \langle \psi(t) | \vec{p}) \underline{\underline{1}} \right) \quad , \\ \underline{\underline{T}}_{\pi} &= \langle \vec{x} | \underline{\underline{T}}_{\pi} | \vec{x} \rangle \quad . \end{aligned}$$

Wir betrachten hier zunächst die Zeitableitung der Impulsdichte (A.4); in der Folge wird zur Umformung der Zeitableitungen der Wellenfunktionen wieder die Schrödinger-Gleichung verwendet:

$$\frac{\partial \vec{\pi}}{\partial t} = -i \frac{\hbar}{2} \left[\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) (\vec{\nabla} \psi) + \psi^* \left(\vec{\nabla} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) - \left(\vec{\nabla} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \psi - (\vec{\nabla} \psi^*) \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \right]$$

$$\begin{aligned}
&= -i\frac{\hbar}{2} \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi^* + V\psi^* \right] (\vec{\nabla}\psi) - (\vec{\nabla}\psi^*) \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + V\psi \right] \right. \\
&\quad \left. + \psi^* \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}\Delta\psi \right) + (\vec{\nabla}V)\psi + V(\vec{\nabla}\psi) \right] \right. \\
&\quad \left. - \frac{i}{\hbar} \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}\Delta\psi^* \right) + (\vec{\nabla}V)\psi^* + V(\vec{\nabla}\psi^*) \right] \psi \right\} \\
&= -\frac{\hbar^2}{4m} \left((\Delta\psi^*)(\vec{\nabla}\psi) + (\vec{\nabla}\psi^*)(\Delta\psi) - \psi^*(\vec{\nabla}\Delta\psi) - (\vec{\nabla}\Delta\psi^*)\psi \right) - (\vec{\nabla}V)\psi^*\psi \quad .
\end{aligned}$$

Als Divergenz des Spannungstensors ergibt sich

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla} \cdot \underline{\underline{T}}_{\pi} &= \\
&= \frac{\hbar^2}{4m} \left(2(\Delta\psi^*)(\vec{\nabla}\psi) + 2[(\vec{\nabla}\psi^*) \cdot \vec{\nabla}] \vec{\nabla}\psi + 2(\Delta\psi)(\vec{\nabla}\psi^*) + 2[(\vec{\nabla}\psi) \cdot \vec{\nabla}] \vec{\nabla}\psi^* \right. \\
&\quad \left. - (\vec{\nabla}\psi^*)(\Delta\psi) - \psi^*(\vec{\nabla}\Delta\psi) - (\vec{\nabla}\psi)(\Delta\psi^*) - \psi(\vec{\nabla}\Delta\psi^*) \right. \\
&\quad \left. - 2[(\vec{\nabla}\psi^*) \cdot \vec{\nabla}] \vec{\nabla}\psi - 2[(\vec{\nabla}\psi) \cdot \vec{\nabla}] \vec{\nabla}\psi^* \right) \\
&= -\frac{\hbar^2}{4m} \left(\psi^*(\vec{\nabla}\Delta\psi) + (\vec{\nabla}\Delta\psi^*)\psi - (\Delta\psi^*)(\vec{\nabla}\psi) - (\vec{\nabla}\psi^*)(\Delta\psi) \right) \quad .
\end{aligned}$$

Damit erhält man, vgl. [32],

$$\frac{\partial \vec{\pi}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \underline{\underline{T}}_{\pi} = -(\vec{\nabla}V)\psi^*\psi \quad (\text{A.10})$$

als Kontinuitätsgleichung mit Inhomogenität für Impulsdichte und Spannungstensor. Die Dichte der Impulsänderung ist die lokale Kraft multipliziert mit der Wahrscheinlichkeitsdichte. Die gesamte Impulsänderung ist dann gegeben durch den Erwartungswert der Kraft. Ein alternativer, über seine Divergenz definierter Spannungstensor kann z. B. geschrieben werden als

$$\underline{\underline{T}}_{\pi}^{(a)} := -\frac{\hbar^2}{4m} \left(\psi^* \vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \psi + \psi \vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \psi^* - (\vec{\nabla} \psi^*) \otimes (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi) \otimes (\vec{\nabla} \psi^*) \right) \quad .$$

Mit Hilfe des Ortsvektors und der Impulsdichte (A.4) läßt sich die Drehimpulsdichte $\vec{\lambda}$ definieren,

$$\vec{\lambda} := \vec{r} \times \vec{\pi} = \frac{\hbar}{2i} \vec{r} \times \left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^* \right) \quad ,$$

mit dem zugehörigen Operator $\vec{\lambda}$,

$$\vec{\lambda} = \frac{1}{2} (\vec{r} \times \vec{p} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \vec{r} \times \vec{p}) \quad , \quad \vec{\lambda} = \langle \vec{x} | \vec{\lambda} | \vec{x} \rangle \quad .$$

Die Zeitableitung der Drehimpulsdichte kann unter Verwendung der erweiterten Kontinuitätsgleichung (A.10) für die Impulsdichte reformuliert werden,

$$\frac{\partial \vec{\lambda}}{\partial t} = \vec{r} \times \frac{\partial \vec{\pi}}{\partial t} = -\vec{r} \times (\vec{\nabla} \cdot \underline{\underline{T}}_{\pi}) + (-\vec{r} \times \vec{\nabla} V) \psi^* \psi \quad .$$

Wir betrachten die i -te Komponente des Kreuzprodukts des Ortsvektors mit der Divergenz des Spannungstensors und verwenden bei den Umformungen dessen Symmetrie,

$$\begin{aligned} \left[\vec{r} \times (\vec{\nabla} \cdot \underline{\underline{T}}_{\pi}) \right]_i &= \varepsilon_{ijk} x_j \partial_l T_{lk}^{(\pi)} = \partial_l (\varepsilon_{ijk} x_j T_{lk}^{(\pi)}) - \varepsilon_{ijk} \delta_{lj} T_{lk}^{(\pi)} \\ &= \partial_l (\varepsilon_{ijk} x_j T_{lk}^{(\pi)}) - \varepsilon_{ijk} T_{jk}^{(\pi)} = \partial_l (\varepsilon_{ijk} x_j T_{lk}^{(\pi)}) \quad , \end{aligned}$$

wodurch sich dieser Term als Divergenz eines Tensors zweiter Stufe schreiben läßt. Mit der Definition

$$T_{li}^{(\lambda)} := \varepsilon_{ijk} x_j T_{lk}^{(\pi)}$$

eines nichtsymmetrischen Tensors zweiter Stufe kann die erweiterte Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \vec{\lambda}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \underline{\underline{T}}_{\lambda} = (-\vec{r} \times \vec{\nabla} V) \psi^* \psi$$

für die Drehimpulsdichte formuliert werden. Die Inhomogenität wird durch die äußere Drehmomentdichte gebildet, die im Aufbau der Leistungsdichte aus (A.6) und der Kraftdichte aus (A.10) folgt, d. h. als Produkt aus Wahrscheinlichkeitsdichte und Drehmoment.

Durch die Multiplikation der Kontinuitätsgleichung mit dem ε -Tensor kommt man zu einer anderen tensoriellen Struktur. Der Drehimpulstensor geht aus dem Drehimpulsvektor hervor,

$$\underline{\underline{\Lambda}} := \underline{\underline{\lambda}} \underline{\underline{\varepsilon}} \quad , \quad \Lambda_{ij} = \varepsilon_{kij} \lambda_k = x_i \pi_j - x_j \pi_i \quad ,$$

und der Drehimpuls-Spannungstensor dritter Stufe aus dem Tensor $\underline{\underline{T}}_{\lambda}$,

$$\underline{\underline{\underline{M}}}_{\lambda} := \underline{\underline{T}}_{\lambda} \underline{\underline{\varepsilon}} \quad , \quad M_{ijk}^{(\lambda)} = T_{il}^{(\lambda)} \varepsilon_{ljk} = T_{ik}^{(\pi)} x_j - T_{ij}^{(\pi)} x_k \quad .$$

Die Umformulierung der Inhomogenität führt zur Definition des Drehmomentdichtetensors $\underline{\underline{D}}$ über seine Elemente,

$$\varepsilon_{lnm} x_n (\partial_m V) \varepsilon_{lij} = x_i \partial_j V - x_j \partial_i V =: D_{ij} \quad ,$$

wodurch die erweiterte Kontinuitätsgleichung schließlich die Form, vgl. [32],

$$\frac{\partial \underline{\underline{\underline{\Lambda}}}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \underline{\underline{\underline{M}}}_{\lambda} = -\underline{\underline{D}} \psi^* \psi$$

annimmt.

A.4 Hydrodynamische Interpretation und Bohmsche Mechanik

An dieser Stelle wird die hydrodynamische Formulierung der nichtrelativistischen Quantenmechanik kurz vorgestellt, in der die Bohmsche Interpretation [3, 4] der Quantenmechanik, in der verborgene Variablen propagiert werden, ihren Ursprung hat. Die hydrodynamische Formulierung geht zurück auf eine Arbeit von Madelung [46] für den wirbelfreien Fall, d. h. ohne Wirbelfäden, und Takabayasi [63] für den allgemeinen Fall. Diese Formulierung und die Bohmsche Interpretation werden umfassend in [32] behandelt. Beziehungen zwischen Teilchen und perfekten Flüssigkeiten werden z. B. in [58] betrachtet.

Die hier beschriebene Formulierung stützt sich einerseits auf die Kontinuitätsgleichung (1.2) für die Wahrscheinlichkeitsdichte und andererseits auf die Impulsbilanz (A.10) mit dem in Abschnitt A.3 eingeführten Spannungstensor \underline{T}_π . In Abschnitt 1.4 ist dessen Polardarstellung angegeben, die hier in die erweiterte Kontinuitätsgleichung (A.10) des Impulses eingesetzt wird ($\varrho = M^2$, $\vec{j} = \varrho \vec{v}$, $\vec{v} = \vec{\nabla} S/m$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \vec{j} + \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{1}{m} \underline{T}_\pi \right) &= -\frac{\vec{\nabla} V}{m} M^2 \quad , \\ \varrho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \varrho (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \\ &+ \vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\hbar^2}{2m^2} \left(2(\vec{\nabla} M) \otimes (\vec{\nabla} M) - (M(\Delta M) + (\vec{\nabla} M)^2) \underline{1} \right) \right] = -\frac{\varrho}{m} \vec{\nabla} V \quad . \end{aligned}$$

Eine vollständige Ersetzung von M zugunsten von ϱ führt zu

$$\varrho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \varrho (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} + \vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\hbar^2}{4m^2} \left(\frac{1}{\varrho} (\vec{\nabla} \varrho) \otimes (\vec{\nabla} \varrho) - (\Delta \varrho) \underline{1} \right) \right] = -\frac{\varrho}{m} \vec{\nabla} V \quad .$$

Der ϱ -abhängige Term der vorhergehenden Gleichung kann (bis auf Faktoren) in der Form

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\varrho \vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \ln \varrho \right) = \varrho \vec{\nabla} \cdot \left[\frac{1}{2\varrho^2} \left(2\varrho \Delta \varrho - (\vec{\nabla} \varrho)^2 \right) \right]$$

geschrieben werden. Damit gewinnt die Gleichung die Gestalt

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} + \vec{\nabla} \cdot \left[\frac{\hbar^2}{8m^2} \frac{1}{\varrho^2} \left((\vec{\nabla} \varrho)^2 - 2\varrho \Delta \varrho \right) \right] = -\frac{1}{m} \vec{\nabla} V \quad . \quad (\text{A.11})$$

Dabei tritt der Gradient der Größe

$$V_Q = \frac{\hbar^2}{4m\varrho} \left(\Delta \varrho - \frac{1}{2\varrho} (\vec{\nabla} \varrho)^2 \right)$$

auf, die das Quantenpotential der Bohmschen Interpretation bildet [3, 4, 32, 8, 9] und in der Hydrodynamik ein Geschwindigkeitspotential darstellt.

Die Bewegungsgleichung der Bohmschen Bahnen ergibt sich aus der Schrödinger-Gleichung (A.1), wobei die Wellenfunktion in Betrag M und Phase S/\hbar aufgespalten wird [3, 32]:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\vec{\nabla} S)^2 + V + V_Q = 0 \quad .$$

Diese Gleichung besitzt die Form einer Hamilton–Jacobi-Gleichung, wobei die Geschwindigkeit durch $\vec{v} = \vec{\nabla} S/m$ an der Stelle \vec{r}_0 durch die Wellenfunktion vorgegeben ist. Eine äquivalente Formulierung ergibt sich aus (A.11), indem die ersten beiden Terme dieser Gleichung als totale Zeitableitung der Geschwindigkeit aufgefaßt werden,

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = -\frac{1}{m} \vec{\nabla} (V + V_Q) \quad .$$

Diese Darstellung entspricht damit einer Newtonschen Bewegungsgleichung.

Die globale Existenz und die Eindeutigkeit der Bohmschen Trajektorien (bei vorgegebenen Anfangsbedingungen) bzw. die der Bohmschen Mechanik wird in [1, 2] erörtert bzw. gezeigt, wobei dort allgemein eine große Klasse von Potentialen und Wellenfunktionen eines N -Teilchen-Systems betrachtet wird.

In [45] werden die Bohmschen Trajektorien auf den Liouville-Raum, d. h. den $2N$ -dimensionalen Konfigurationsraum erweitert, indem die Ortsdarstellung der Dichtematrix in Betrag und Phase aufgespalten wird und unter Verwendung der Quanten-Mastergleichung eine Hamilton–Jacobi-Gleichung für die Wirkung aufgestellt wird, die ohne dissipative und dekohärente Terme in zwei entsprechende Gleichungen der Bohmschen Theorie entkoppelt. Damit werden z. B. Dekohärenz- und Relaxationsprozesse in gedämpften Oszillatoren untersucht. Die hydrodynamische Formulierung für gemischte Zustände in diesem Raum mit der skizzierten Herleitung wurde in [54] angegeben.

A.5 Vielteilchendichten

Der Vollständigkeit wegen sollen hier noch einige der Dichten aus Abschnitt A.2 auf mehrere Teilchen verallgemeinert werden. Die N -Teilchen-Schrödinger-Gleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_i \psi + V\psi \quad .$$

Wie der Ausdruck z. B. für eine klassische Gesamtenergie hängen die Vielteilchendichten im allgemeinen von allen Teilchenkoordinaten ab. Die Verallgemeinerung der Energiedichte 1 auf N Teilchen lautet daher

$$\varepsilon_1 := \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} (\vec{\nabla}_i \psi^*) \cdot (\vec{\nabla}_i \psi) + V\psi^* \psi \quad .$$

Der dem Einteilchenfall entsprechende Operator schreibt sich

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\varepsilon}_1 &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \vec{p}_i |\psi(t)\rangle \cdot \langle\psi(t)| \vec{p}_i + \frac{V}{2} |\psi(t)\rangle \langle\psi(t)| + |\psi(t)\rangle \langle\psi(t)| \frac{V}{2} \quad , \\ \varepsilon_1 &= \langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N | \boldsymbol{\varepsilon}_1 | \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N \rangle \quad .\end{aligned}$$

Für jedes Teilchen existiert eine separate Impulsdichte, vgl. (A.4),

$$\vec{\pi}_i := m_i \vec{j}_i = \frac{\hbar}{2i} \left(\psi^* \vec{\nabla}_i \psi - \psi \vec{\nabla}_i \psi^* \right) \quad ,$$

mit zugehörigem Operator

$$\vec{\pi}_i = \frac{1}{2} (\vec{p}_i |\psi(t)\rangle \langle\psi(t)| + |\psi(t)\rangle \langle\psi(t)| \vec{p}_i) \quad , \quad \vec{\pi}_i = \langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N | \vec{\pi}_i | \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N \rangle \quad .$$

Dementsprechend existiert ein Satz von Energiestromdichten 1, vgl. (A.5),

$$\begin{aligned}\vec{\pi}_{\varepsilon 1i} &:= -\frac{\hbar^2}{2m_i} \left[(\vec{\nabla}_i \psi^*) \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) (\vec{\nabla}_i \psi) \right] \\ &= \frac{\hbar i}{2m_i} \left[(\vec{\nabla}_i \psi^*) \left(-\sum_{l=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_l} \Delta_l \psi + V \psi \right) - \left(-\sum_{l=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_l} \Delta_l \psi^* + V \psi^* \right) (\vec{\nabla}_i \psi) \right] \quad ,\end{aligned}$$

mit den hermiteschen Operatoren

$$\begin{aligned}\vec{\pi}_{\varepsilon 1i} &= \frac{1}{2m_i} (\vec{p}_i |\psi(t)\rangle \langle\psi(t)| H + H |\psi(t)\rangle \langle\psi(t)| \vec{p}_i) \quad , \\ \vec{\pi}_{\varepsilon 1i} &= \langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N | \vec{\pi}_{\varepsilon 1i} | \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N \rangle \quad .\end{aligned}$$

Die erweiterte Kontinuitätsgleichung, die Energiebilanzgleichung des Systems,

$$\frac{\partial \varepsilon_1}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \vec{\nabla}_i \cdot \vec{\pi}_{\varepsilon 1i} = \frac{\partial V}{\partial t} \psi^* \psi \quad ,$$

enthält eine Summe über alle Divergenzen der einzelnen Energiestromdichten.

Die Inhomogenität ist formal dieselbe wie im Einteilchenfall, vgl. (A.6).

Energiedichte 2 wird ebenso gebildet wie Energiedichte 1, vgl. (A.7),

$$\varepsilon_2 := -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{4m_i} (\psi^* (\Delta_i \psi) + (\Delta_i \psi^*) \psi) + V \psi^* \psi = \frac{i\hbar}{2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \quad ,$$

und besitzt einen entsprechenden Operator

$$\boldsymbol{\varepsilon}_2 = \frac{1}{2} (H |\psi(t)\rangle \langle\psi(t)| + |\psi(t)\rangle \langle\psi(t)| H) \quad , \quad \varepsilon_2 = \langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N | \boldsymbol{\varepsilon}_2 | \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N \rangle \quad ,$$

und die Energiestromdichten 2 ergeben sich entsprechend (A.8),

$$\begin{aligned}
\vec{\pi}_{\varepsilon 2i} &= \frac{\hbar i}{2m_i} \left[\sum_{l=1}^N \frac{\hbar^2}{4m_l} \left(\psi^* (\vec{\nabla}_i \Delta_l \psi) - (\vec{\nabla}_i \psi^*) (\Delta_l \psi) + (\Delta_l \psi^*) (\vec{\nabla}_i \psi) - (\vec{\nabla}_i \Delta_l \psi^*) \psi \right) \right. \\
&\quad \left. - V \left(\psi^* (\vec{\nabla}_i \psi) - (\vec{\nabla}_i \psi^*) \psi \right) \right] \\
&= -\frac{\hbar^2}{4m_i} \left[(\vec{\nabla}_i \psi^*) \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) + (\vec{\nabla}_i \psi) \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) - \psi^* \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla}_i \psi \right) - \psi \left(\frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla}_i \psi^* \right) \right],
\end{aligned}$$

mit den zugehörigen Operatoren

$$\begin{aligned}
\vec{\pi}_{\varepsilon 2i} &= \frac{1}{4m_i} \left(\vec{p}_i |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| H + H |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \vec{p}_i \right. \\
&\quad \left. + \vec{p}_i H |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| H \vec{p}_i \right), \\
\vec{\pi}_{\varepsilon 2i} &= \langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N | \vec{\pi}_{\varepsilon 2i} | \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N \rangle.
\end{aligned}$$

Die Kontinuitätsgleichung hat die gleiche Form wie im Fall 1,

$$\frac{\partial \varepsilon_2}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \vec{\nabla}_i \cdot \vec{\pi}_{\varepsilon 2i} = \frac{\partial V}{\partial t} \psi^* \psi.$$

Anhang B

Eindimensionale Stufenpotentiale

An dieser Stelle betrachten wir die allgemeine Lösung der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung, siehe z. B. [9, 60, 61, 24], für zeitunabhängige Stufenpotentiale mit endlich vielen Stufen,

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

die mit dem zeitlichen Separationsansatz

$$\psi(x, t) = \varphi_E(x) e^{-iEt/\hbar}$$

in die gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_E(x, t) + V(x) \varphi_E(x, t) = E \varphi_E(x, t) \quad (\text{B.1})$$

übergeführt wird. Das Stufenpotential (d. h., das Potential ist stückweise konstant) wird wie folgt parametrisiert:

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & , \quad R_1 : x \leq x_1 \\ V_2 & , \quad R_2 : x_1 < x \leq x_2 \\ \vdots & \\ V_{N-1} & , \quad R_{N-1} : x_{N-2} < x \leq x_{N-1} \\ V_N & , \quad R_N : x > x_{N-1} \end{cases} .$$

Dabei bezeichnet R_n , $n = 1, \dots, N$, die Potentialregion der Nummer n . Der Lösungsansatz in den einzelnen Bereichen ist durch trigonometrische Funktionen oder (komplexe) Exponentialfunktionen gegeben,

$$\varphi_E(x) = \begin{cases} \varphi_{E,1}(x) & , \quad x \leq x_1 \\ \varphi_{E,2}(x) & , \quad x_1 < x \leq x_2 \\ \vdots & \\ \varphi_{E,N-1}(x) & , \quad x_{N-2} < x \leq x_{N-1} \\ \varphi_{E,N}(x) & , \quad x > x_{N-1} \end{cases}$$

$$= \begin{cases} A_1 e^{ik_1(x-x_1)} + B_1 e^{-ik_1(x-x_1)} & , \quad x \leq x_1 \\ A_2 e^{ik_2(x-x_1)} + B_2 e^{-ik_2(x-x_1)} & , \quad x_1 < x \leq x_2 \\ \vdots & \\ A_{N-1} e^{ik_{N-1}(x-x_{N-2})} + B_{N-1} e^{-ik_{N-1}(x-x_{N-2})} & , \quad x_{N-2} < x \leq x_{N-1} \\ A_N e^{ik_N(x-x_{N-1})} + B_N e^{-ik_N(x-x_{N-1})} & , \quad x > x_{N-1} \end{cases} ,$$

$$k_n = \sqrt{2m(E - V_n)/\hbar} \quad ,$$

wobei die Wellenzahl k_n reell für Energien oberhalb des lokalen Potentialwertes und imaginär für Energien unterhalb dieses Wertes ist. Die allgemeine energieabhängige Lösung der Differentialgleichung (B.1) in der Region n für Energien ungleich und gleich dem dortigen Potential ist gegeben durch

$$\varphi_{E,n}(x) = A_{E,n} e^{ik_{E,n}(x-x_{n-1})} + B_{E,n} e^{-ik_{E,n}(x-x_{n-1})} \quad , \quad x \in R_n, E \neq V_n \quad , \quad (\text{B.2})$$

$$\varphi_{E,n}(x) = A_{E,n} + B_{E,n}(x - x_{n-1}) \quad , \quad x \in R_n, E = V_n \quad . \quad (\text{B.3})$$

In diesen verkürzten Darstellungen wird für die Potentialgrenzen $x_0 := x_1$ eingeführt. An den Übergangsstellen x_n der Potentiale gelten die üblichen Stetigkeitsbedingungen

$$\varphi_{E,n}(x_n) = \varphi_{E,n+1}(x_n) \quad , \quad \varphi'_{E,n}(x_n) = \varphi'_{E,n+1}(x_n) \quad , \quad 1 \leq n \leq N-1 \quad ,$$

für die Wellenfunktion und deren Ortsableitung. Aus diesen ergibt sich das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} A_n e^{ik_n(x_n-x_{n-1})} + B_n e^{-ik_n(x_n-x_{n-1})} &= A_{n+1} + B_{n+1} \quad , \\ ik_n(A_n e^{ik_n(x_n-x_{n-1})} - B_n e^{-ik_n(x_n-x_{n-1})}) &= ik_{n+1}(A_{n+1} - B_{n+1}) \end{aligned}$$

für die Koeffizienten A_n, B_n der Konstituentenwellenfunktionen. Es läßt sich als Matrixgleichung

$$\begin{pmatrix} e^{ik_n(x_n-x_{n-1})} & e^{-ik_n(x_n-x_{n-1})} \\ ik_n e^{ik_n(x_n-x_{n-1})} & -ik_n e^{-ik_n(x_n-x_{n-1})} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_{n+1} & -ik_{n+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix}$$

für die Koeffizienten in den einzelnen Regionen schreiben. Die Inversion der Matrix vor den Koeffizienten in Region n liefert

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} e^{ik_n(x_n-x_{n-1})} & e^{-ik_n(x_n-x_{n-1})} \\ ik_n e^{ik_n(x_n-x_{n-1})} & -ik_n e^{-ik_n(x_n-x_{n-1})} \end{pmatrix}^{-1} = \\ & = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} e^{-ik_n(x_n-x_{n-1})} & -\frac{1}{2k_n} e^{-ik_n(x_n-x_{n-1})} \\ \frac{1}{2} e^{ik_n(x_n-x_{n-1})} & \frac{1}{2k_n} e^{ik_n(x_n-x_{n-1})} \end{pmatrix} \quad , \end{aligned}$$

womit sich in diesem Fall eine Rekursion für die Koeffizienten von rechts nach links ergibt, wenn die Koeffizienten in der äußersten Region bekannt sind,

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} &= \\
&= \begin{pmatrix} e^{ik_n(x_n-x_{n-1})} & e^{-ik_n(x_n-x_{n-1})} \\ ik_n e^{ik_n(x_n-x_{n-1})} & -ik_n e^{-ik_n(x_n-x_{n-1})} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_{n+1} & -ik_{n+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_{n+1}}{k_n}\right) e^{-ik_n(x_n-x_{n-1})} & \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_{n+1}}{k_n}\right) e^{-ik_n(x_n-x_{n-1})} \\ \frac{1}{2} \left(1 - \frac{k_{n+1}}{k_n}\right) e^{ik_n(x_n-x_{n-1})} & \frac{1}{2} \left(1 + \frac{k_{n+1}}{k_n}\right) e^{ik_n(x_n-x_{n-1})} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} .
\end{aligned}$$

Die so gebildete Beziehung der Koeffizienten der Wellenfunktion auf Matrizen-ebene ist eine Anwendung der sogenannten Transfermatrixmethode.

B.1 Streuzustände. Orthogonalität. Normierung

Wir betrachten eine allgemeine eindimensionale Streuwelle in einem Potential mit den Werten $V_1 = 0$ und V_N . In den Regionen $x \leq x_1$ und $x > x_{N-1}$ kann die Wellenfunktion in der Form

$$\begin{aligned}
\varphi_1(x) &= A'_1 e^{ik_1 x} + B'_1 e^{-ik_1 x} , \\
\varphi_N(x) &= A'_N e^{ik_N x} + B'_N e^{-ik_N x}
\end{aligned}$$

geschrieben werden. Über eine Skalierung der gestrichenen Koeffizienten werden ungestrichene Koeffizienten für diesen Abschnitt wie folgt eingeführt, vgl. [9]:

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{k_N}{k_1}} A'_N \\ B'_1 \end{pmatrix} , \quad \begin{pmatrix} A_1 \\ B_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A'_1 \\ \sqrt{\frac{k_N}{k_1}} B'_N \end{pmatrix} .$$

Die Streumatrix S ist unitär,

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} , \quad (\text{B.4})$$

$$SS^\dagger = 1 \quad , \quad \begin{pmatrix} S_{11}S_{11}^* + S_{12}S_{12}^* & S_{11}S_{21}^* + S_{12}S_{22}^* \\ S_{21}S_{11}^* + S_{22}S_{12}^* & S_{21}S_{21}^* + S_{22}S_{22}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

bzw.

$$S^\dagger S = 1 \quad , \quad \begin{pmatrix} S_{11}^*S_{11} + S_{21}^*S_{21} & S_{11}^*S_{12} + S_{21}^*S_{22} \\ S_{12}^*S_{11} + S_{22}^*S_{21} & S_{12}^*S_{12} + S_{22}^*S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} , \quad (\text{B.6})$$

und verknüpft hier einlaufende und auslaufende Konstituentenwellen der eindimensionalen Streuung,

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_1 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_1 \\ B_N \end{pmatrix} ,$$

wobei die Koeffizienten gewählt werden als

$$A_1 \neq 0 \quad , \quad B_N = 0 \quad , \quad A_N = S_{11}A_1 \quad , \quad B_1 = S_{21}A_1$$

für eine ausschließlich von links einlaufende und nach rechts auslaufende Welle und als

$$A_1 = 0 \quad , \quad B_N \neq 0 \quad , \quad A_N = S_{12}B_N \quad , \quad B_1 = S_{22}B_N$$

für eine ausschließlich von rechts einlaufende und nach links auslaufende Welle. Die zugehörigen (asymptotischen) Darstellungen der Wellenfunktionen der beiden betrachteten Fälle lauten damit

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= \begin{cases} A'_1 e^{ik_1 x} + B'_1 e^{-ik_1 x} & , \quad x \rightarrow -\infty \\ A'_N e^{ik_N x} & , \quad x \rightarrow +\infty \end{cases} \\ &= \begin{cases} A'_1 (e^{ik_1 x} + S_{21} e^{-ik_1 x}) & , \quad x \rightarrow -\infty \\ A'_1 \sqrt{\frac{k_1}{k_N}} S_{11} e^{ik_N x} & , \quad x \rightarrow +\infty \end{cases} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \phi_2(x) &= \begin{cases} B'_1 e^{-ik_1 x} & , \quad x \rightarrow -\infty \\ A'_N e^{ik_N x} + B'_N e^{-ik_N x} & , \quad x \rightarrow +\infty \end{cases} \\ &= \begin{cases} B'_N \sqrt{\frac{k_N}{k_1}} S_{22} e^{-ik_1 x} & , \quad x \rightarrow -\infty \\ B'_N (S_{12} e^{ik_N x} + e^{-ik_N x}) & , \quad x \rightarrow +\infty \end{cases} . \end{aligned}$$

Zur Bestimmung (der asymptotisch beitragenden Teile) des Überlapps zweier Wellenfunktionen verschiedener Wellenzahlen betrachten wir zunächst die mittels jeweils einer Exponentialfunktionen regularisierten (uneigentlichen) Integrale zweier Konstituentenwellen in den jeweiligen Raumgebieten. Für den rechten Bereich ergibt sich

$$\begin{aligned} &\int_{x_r}^{\infty} C_1 e^{ik_N^{(1)} x} C_2^* e^{-ik_N^{(2)} x} e^{-\delta x} dx = \\ &= C_1 C_2^* \int_{x_r}^{\infty} e^{i(k_N^{(1)} - k_N^{(2)} + i\delta)x} dx = C_1 C_2^* \frac{i}{k_N^{(1)} - k_N^{(2)} + i\delta} e^{i(k_N^{(1)} - k_N^{(2)} + i\delta)x_r} \end{aligned}$$

und für den linken Bereich

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{x_1} C_1 e^{ik_1^{(1)} x} C_2^* e^{-ik_1^{(2)} x} e^{\delta x} dx = \\ &= C_1 C_2^* \int_{-\infty}^{x_1} e^{i(k_1^{(1)} - k_1^{(2)} - i\delta)x} dx = C_1 C_2^* \frac{(-i)}{k_1^{(1)} - k_1^{(2)} - i\delta} e^{i(k_1^{(1)} - k_1^{(2)} - i\delta)x_1} . \end{aligned}$$

Der (asymptotische) Überlapp bzw. das Skalarprodukt zweier Wellenfunktionen $\phi_1(k_1^{(1)}, x)$ und $\phi_2(k_1^{(2)}, x)$ ist damit gegeben durch ($C_1 = A_1'^{(1)}$, $C_2 = B_N'^{(2)}$)

$$\begin{aligned}
& \left(\int_{-\infty}^{x_1} + \int_{x_r}^{\infty} \right) \phi_1(k_1^{(1)}, x) \phi_2^*(k_1^{(2)}, x) dx = \\
& = \int_{-\infty}^{x_1} C_1 \left(e^{ik_1^{(1)}x} + S_{21}(k_1^{(1)})e^{-ik_1^{(1)}x} \right) C_2^* \sqrt{\frac{k_N^{(2)}}{k_1^{(2)}}} S_{22}^*(k_1^{(2)}) e^{ik_1^{(2)}x} e^{\delta x} dx \\
& \quad + \int_{x_r}^{\infty} C_1 \sqrt{\frac{k_1^{(1)}}{k_N^{(1)}}} S_{11}(k_1^{(1)}) e^{ik_N^{(1)}x} C_2^* \left(S_{12}^*(k_1^{(2)}) e^{-ik_N^{(2)}x} + e^{ik_N^{(2)}x} \right) e^{-\delta x} dx \\
& = C_1 C_2^* \sqrt{\frac{k_N^{(2)}}{k_1^{(2)}}} S_{22}^*(k_1^{(2)}) \frac{(-i)}{k_1^{(1)} + k_1^{(2)} - i\delta} e^{i(k_1^{(1)} + k_1^{(2)} - i\delta)x_1} \\
& \quad + C_1 C_2^* \sqrt{\frac{k_N^{(2)}}{k_1^{(2)}}} S_{21}(k_1^{(1)}) S_{22}^*(k_1^{(2)}) \frac{(-i)}{k_1^{(2)} - k_1^{(1)} - i\delta} e^{i(k_1^{(2)} - k_1^{(1)} - i\delta)x_1} \\
& \quad + C_1 C_2^* \sqrt{\frac{k_1^{(1)}}{k_N^{(1)}}} S_{11}(k_1^{(1)}) S_{12}^*(k_1^{(2)}) \frac{i}{k_N^{(1)} - k_N^{(2)} + i\delta} e^{i(k_N^{(1)} - k_N^{(2)} + i\delta)x_r} \\
& \quad + C_1 C_2^* \sqrt{\frac{k_1^{(1)}}{k_N^{(1)}}} S_{11}(k_1^{(1)}) \frac{i}{k_N^{(1)} + k_N^{(2)} + i\delta} e^{i(k_N^{(1)} + k_N^{(2)} + i\delta)x_r} .
\end{aligned}$$

In diesem Ausdruck wird nun der Grenzwert $\delta \rightarrow 0$ ausgeführt, wobei die Terme mit den Differenzen in Hauptwertintegral und δ -Distribution aufgespalten werden:

$$\begin{aligned}
I_{12} & := C_1 C_2^* \sqrt{\frac{k_N^{(2)}}{k_1^{(2)}}} S_{22}^*(k_1^{(2)}) \frac{(-i)}{k_1^{(1)} + k_1^{(2)}} e^{i(k_1^{(2)} + k_1^{(1)})x_1} \\
& \quad + C_1 C_2^* S_{11}(k_1^{(1)}) \sqrt{\frac{k_1^{(1)}}{k_N^{(1)}}} \frac{i}{k_N^{(1)} + k_N^{(2)}} e^{i(k_N^{(1)} + k_N^{(2)})x_r} \\
& \quad + C_1 C_2^* \sqrt{\frac{k_N^{(2)}}{k_1^{(2)}}} S_{21}(k_1^{(1)}) S_{22}^*(k_1^{(2)}) \left(-i \text{P} \frac{1}{k_1^{(2)} - k_1^{(1)}} e^{i(k_1^{(2)} - k_1^{(1)})x_1} + \pi \delta(k_1^{(2)} - k_1^{(1)}) \right) \\
& \quad + C_1 C_2^* \sqrt{\frac{k_1^{(1)}}{k_N^{(1)}}} S_{11}(k_1^{(1)}) S_{12}^*(k_1^{(2)}) \left(i \text{P} \frac{1}{k_N^{(1)} - k_N^{(2)}} e^{i(k_N^{(1)} - k_N^{(2)})x_r} + \pi \delta(k_N^{(1)} - k_N^{(2)}) \right) .
\end{aligned}$$

Die δ -Distribution bezüglich der Wellenzahlen in Region N wird in die bezüglich Region 1 verwandelt,

$$\delta(k_N^{(1)} - k_N^{(2)}) = \delta(k_1^{(1)} - k_1^{(2)}) \left| \frac{dk_N^{(1)}}{dk_1^{(1)}} \right|^{-1} = \delta(k_1^{(1)} - k_1^{(2)}) \left| \frac{dk_1^{(1)}}{dk_N^{(1)}} \right| ,$$

wobei für die auftretende Differentiation der Wellenzahlen gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2(k_n^{(1)})^2}{2m} + V_n = E^{(1)} \quad (n = 1, N) &\quad \rightarrow \quad k_1^{(1)} = \sqrt{(k_N^{(1)})^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(V_N - V_1)} \\ \rightarrow \quad \frac{dk_1^{(1)}}{dk_N^{(1)}} = \frac{k_N^{(1)}}{k_1^{(1)}} &\quad . \end{aligned}$$

Für den Anteil mit δ -Distributionen des Ausdrucks I_{12} erhält man

$$\begin{aligned} C_1 C_2^* \pi \delta(k_1^{(1)} - k_1^{(2)}) &\left(\sqrt{\frac{k_N^{(2)}}{k_1^{(2)}}} S_{21}(k_1^{(1)}) S_{22}^*(k_1^{(2)}) + \sqrt{\frac{k_1^{(1)}}{k_N^{(1)}} \frac{k_N^{(1)}}{k_1^{(1)}}} S_{11}(k_1^{(1)}) S_{12}^*(k_1^{(2)}) \right) \\ &= C_1 C_2^* \pi \delta(k_1^{(1)} - k_1^{(2)}) \sqrt{\frac{k_N^{(1)}}{k_1^{(1)}}} \left(S_{21}(k_1^{(1)}) S_{22}^*(k_1^{(1)}) + S_{11}(k_1^{(1)}) S_{12}^*(k_1^{(1)}) \right) = 0 \end{aligned}$$

wegen der Unitarität (B.6) der Streumatrix S . Der Hauptwertanteil, der aus den Wellenzahlen des rechten Bereichs gebildet wird, kann in einen entsprechenden Term mit Wellenzahlen des ersten Bereichs umgeschrieben werden,

$$\text{P} \frac{1}{k_N^{(2)} - k_N^{(1)}} = \frac{k_1^{(2)} - k_1^{(1)}}{k_N^{(2)} - k_N^{(1)}} \text{P} \frac{1}{k_1^{(2)} - k_1^{(1)}} = \frac{k_N^{(2)} + k_N^{(1)}}{k_1^{(2)} + k_1^{(1)}} \text{P} \frac{1}{k_1^{(2)} - k_1^{(1)}} \quad .$$

Damit ergibt sich für den Hauptwertanteil von I_{12} der Ausdruck

$$\begin{aligned} C_1 C_2^* &\left(\sqrt{\frac{k_N^{(2)}}{k_1^{(2)}}} S_{21}(k_1^{(1)}) S_{22}^*(k_1^{(2)}) \text{P} \frac{-i}{k_1^{(2)} - k_1^{(1)}} e^{i(k_1^{(2)} - k_1^{(1)})x_1} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{k_1^{(1)}}{k_N^{(1)}}} S_{11}(k_1^{(1)}) S_{12}^*(k_1^{(2)}) \text{P} \frac{-i}{k_N^{(2)} - k_N^{(1)}} e^{i(k_N^{(1)} - k_N^{(2)})x_r} \right) \\ &= C_1 C_2^* \left(\sqrt{\frac{k_N^{(2)}}{k_1^{(2)}}} S_{21}(k_1^{(1)}) S_{22}^*(k_1^{(2)}) e^{i(k_1^{(2)} - k_1^{(1)})x_1} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{k_1^{(1)}}{k_N^{(1)}} \frac{k_N^{(2)} + k_N^{(1)}}{k_1^{(2)} + k_1^{(1)}}} S_{11}(k_1^{(1)}) S_{12}^*(k_1^{(2)}) e^{i(k_N^{(1)} - k_N^{(2)})x_r} \right) \text{P} \frac{-i}{k_1^{(2)} - k_1^{(1)}} \quad . \end{aligned}$$

Die algebraischen Vorfaktoren in der letzten großen runden Klammer werden im Grenzfall $k_1^{(2)} \rightarrow k_1^{(1)}$ gleich, und die Exponentialfunktionen streben gegen Eins. Damit verbleibt wie für den Ausdruck mit den δ -Distributionen ein im Grenzwert verschwindender Term aus der Unitaritätsrelation (B.6) der S -Matrix. Zusammen mit dem singulären Hauptwertausdruck bleibt der Gesamtausdruck, der im Limes in eine Wellenzahl-Ableitung der runden Klammer übergeht, endlich, womit er keinen Beitrag zum Überlapp im Kontinuumsfall liefert. Die beiden Zustände $\phi_1(k_1^{(1)}, x)$ und $\phi_2(k_1^{(2)}, x)$ sind damit orthogonal für alle $k_1^{(1)}, k_1^{(2)}$.

Zur Normierung der Zustände betrachten wir den Überlapp zweier gleichartiger Wellenfunktionen $\phi_1(k_1^{(1)}, x)$ und $\phi_1(k_1^{(2)}, x)$ mit verschiedenen Wellenzahlen $k_1^{(1)}$ und $k_1^{(2)}$ im Außenbereich und Integrale mit geeigneten Regularisierungen ($C_1 = A_1'^{(1)}$, $C_2 = A_1'^{(2)}$):

$$\begin{aligned}
& \left(\int_{-\infty}^{x_1} + \int_{x_r}^{\infty} \right) \phi_1(k_1^{(1)}, x) \phi_1^*(k_1^{(2)}, x) dx = \\
& = \int_{-\infty}^{x_1} C_1 \left(e^{ik_1^{(1)}x} + S_{21}(k_1^{(1)}) e^{-ik_1^{(1)}x} \right) C_2^* \left(e^{-ik_1^{(2)}x} + S_{21}^*(k_1^{(2)}) e^{ik_1^{(2)}x} \right) e^{\delta x} dx \\
& \quad + \int_{x_r}^{\infty} C_1 \sqrt{\frac{k_1^{(1)}}{k_N^{(1)}}} S_{11}(k_1^{(1)}) e^{ik_N^{(1)}x} C_2^* \sqrt{\frac{k_1^{(2)}}{k_N^{(2)}}} S_{11}^*(k_1^{(2)}) e^{-ik_N^{(2)}x} e^{-\delta x} dx \\
& = C_1 C_2^* \frac{(-i)}{k_1^{(1)} - k_1^{(2)} - i\delta} e^{i(k_1^{(1)} - k_1^{(2)} - i\delta)x_1} \\
& \quad + C_1 C_2^* S_{21}(k_1^{(1)}) S_{21}^*(k_1^{(2)}) \frac{(-i)}{k_1^{(2)} - k_1^{(1)} - i\delta} e^{i(k_1^{(2)} - k_1^{(1)} - i\delta)x_1} \\
& \quad + C_1 C_2^* S_{21}(k_1^{(1)}) \frac{i}{k_1^{(2)} + k_1^{(1)} + i\delta} e^{-i(k_1^{(1)} + k_1^{(2)} + i\delta)x_1} \\
& \quad + C_1 C_2^* S_{21}^*(k_1^{(2)}) \frac{-i}{k_1^{(2)} + k_1^{(1)} - i\delta} e^{i(k_1^{(1)} + k_1^{(2)} - i\delta)x_1} \\
& \quad + C_1 C_2^* \sqrt{\frac{k_1^{(1)} k_1^{(2)}}{k_N^{(1)} k_N^{(2)}}} S_{11}(k_1^{(1)}) S_{11}^*(k_1^{(2)}) \frac{i}{k_N^{(1)} - k_N^{(2)} + i\delta} e^{i(k_N^{(1)} - k_N^{(2)} + i\delta)x_r} .
\end{aligned}$$

Im Grenzwert $\delta \rightarrow 0$ erhält man wie oben einen Ausdruck mit δ -Distributionen und Hauptwertintegralen,

$$\begin{aligned}
& C_1 C_2^* (-i) \text{P} \frac{1}{k_1^{(1)} - k_1^{(2)}} e^{i(k_1^{(1)} - k_1^{(2)})x_1} + C_1 C_2^* \pi \delta(k_1^{(1)} - k_1^{(2)}) \\
& + C_1 C_2^* S_{21}(k_1^{(1)}) S_{21}^*(k_1^{(2)}) \left((-i) \text{P} \frac{1}{k_1^{(2)} - k_1^{(1)}} e^{i(k_1^{(2)} - k_1^{(1)})x_1} + \pi \delta(k_1^{(2)} - k_1^{(1)}) \right) \\
& + C_1 C_2^* S_{21}(k_1^{(1)}) \frac{i}{k_1^{(2)} + k_1^{(1)}} e^{-i(k_1^{(1)} + k_1^{(2)})x_1} + C_1 C_2^* S_{21}^*(k_1^{(2)}) \frac{-i}{k_1^{(2)} + k_1^{(1)}} e^{i(k_1^{(1)} + k_1^{(2)})x_1} \\
& + C_1 C_2^* \sqrt{\frac{k_1^{(1)} k_1^{(2)}}{k_N^{(1)} k_N^{(2)}}} S_{11}(k_1^{(1)}) S_{11}^*(k_1^{(2)}) \left(i \text{P} \frac{1}{k_N^{(1)} - k_N^{(2)}} e^{i(k_N^{(1)} - k_N^{(2)})x_r} + \pi \delta(k_N^{(1)} - k_N^{(2)}) \right) \\
& =: I_{11} .
\end{aligned}$$

Mit den bereits für I_{12} benutzten Umformungen erhält man für die Terme von I_{11} , die δ -Distributionen enthalten ($C_1 C_2^* \rightarrow |A_1'|^2$),

$$\begin{aligned}
& |A'_1|^2 \left(\pi \delta(k_1^{(1)} - k_1^{(2)}) + |S_{21}(k_1^{(1)})|^2 \pi \delta(k_1^{(1)} - k_1^{(2)}) \right. \\
& \quad \left. + \frac{k_1^{(1)}}{k_N^{(1)}} |S_{11}(k_1^{(1)})|^2 \pi \delta(k_N^{(1)} - k_N^{(2)}) \right) \\
&= |A'_1|^2 \left(1 + |S_{21}(k_1^{(1)})|^2 \right) \pi \delta(k_1^{(1)} - k_1^{(2)}) \\
& \quad + |A'_1|^2 \frac{k_1^{(1)}}{k_N^{(1)}} |S_{11}(k_1^{(1)})|^2 \pi \frac{k_N^{(1)}}{k_1^{(1)}} \delta(k_1^{(1)} - k_1^{(2)}) \\
&= |A'_1|^2 \left(1 + |S_{21}(k_1^{(1)})|^2 + |S_{11}(k_1^{(1)})|^2 \right) \pi \delta(k_1^{(1)} - k_1^{(2)}) \\
&= |A'_1|^2 2\pi \delta(k_1^{(1)} - k_1^{(2)}) \quad .
\end{aligned}$$

Dabei wurde im letzten Schritt wieder (B.6) verwendet. Der Term mit den Hauptwertintegralen läßt sich ebenso entsprechend dem vorhergehenden für I_{12} behandeln,

$$\begin{aligned}
& C_1 C_2^* \left(-i \text{P} \frac{1}{k_1^{(1)} - k_1^{(2)}} e^{i(k_1^{(1)} - k_1^{(2)})x_1} + i S_{21}(k_1^{(1)}) S_{21}^*(k_1^{(2)}) \text{P} \frac{1}{k_1^{(1)} - k_1^{(2)}} e^{-i(k_1^{(1)} - k_1^{(2)})x_1} \right) \\
& + i C_1 C_2^* \sqrt{\frac{k_1^{(1)} k_1^{(2)}}{k_N^{(1)} k_N^{(2)}}} S_{11}(k_1^{(1)}) S_{11}^*(k_1^{(2)}) \frac{k_N^{(1)} + k_N^{(2)}}{k_1^{(1)} + k_1^{(2)}} \text{P} \frac{1}{k_1^{(1)} - k_1^{(2)}} e^{i(k_N^{(1)} - k_N^{(2)})x_r} \\
&= C_1 C_2^* (-i) \text{P} \frac{1}{k_1^{(1)} - k_1^{(2)}} \left(e^{i(k_1^{(1)} - k_1^{(2)})x_1} - S_{21}(k_1^{(1)}) S_{21}^*(k_1^{(2)}) e^{-i(k_1^{(1)} - k_1^{(2)})x_1} \right. \\
& \quad \left. - \sqrt{\frac{k_1^{(1)} k_1^{(2)}}{k_N^{(1)} k_N^{(2)}}} \frac{k_N^{(1)} + k_N^{(2)}}{k_1^{(1)} + k_1^{(2)}} S_{11}(k_1^{(1)}) S_{11}^*(k_1^{(2)}) e^{i(k_N^{(1)} - k_N^{(2)})x_r} \right) \quad .
\end{aligned}$$

Die algebraischen Vorfaktoren in der letzten großen runden Klammer streben in diesem Fall im Grenzwert $k_1^{(2)} \rightarrow k_1^{(1)}$ wie die Exponentialfunktionen gegen Eins. Wieder aufgrund von (B.6) verschwindet diese Klammer im betrachteten Grenzwert, womit sich wegen der Hauptwertsingularität wieder die Ableitung der Klammer als endlicher Term ergibt. Die Kontinuumsnormierung ist damit gegeben durch $|A'_1|^2 2\pi \delta(k_1^{(1)} - k_1^{(2)})$.

B.2 Gebundene Zustände. Eigenwertsuche

Die Eigenwertsuche für eindimensionale Stufenpotentiale wurde zur Illustration transformierter Potentiale exakt lösbarer Probleme in der inversen Spektraltheorie entwickelt und in [61] beschrieben und angewendet. Bereits dort wurde es nötig, alle Eigenwerte unabhängig von ihrer Verteilung bzw. Lage in einem vor-

gegebenen Energieintervall ohne manuelle Intervention zu finden. Dieser Algorithmus wurde zur Berechnung der (ursprünglichen) Eigenwerte der Stufenpotentiale einiger Bilder in [10] und [62] verwendet.

Die Randbedingung an der rechten Seite für Streuzustände mit nach rechts auslaufender Welle ($E > V_N$) oder die aus der Normierbarkeit für gebundene Zustände ($E < V_N$) folgende lautet

$$\varphi_N(x) = A_N e^{ik_N(x-x_{N-1})} = A_N e^{-\kappa_N(x-x_{N-1})} \quad , \quad \text{d. h.} \quad \begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad .$$

Mit diesen Anfangswerten werden mittels der zuvor beschriebenen Transfermatrixmethode die Koeffizienten in den einzelnen Bereichen berechnet. Die Eigenwertbedingung gebundener Zustände ist im Falle $V_1 < \infty$ durch das Verschwinden des Koeffizienten der fallenden Exponentialfunktion

$$C(E) := A_1(E) = 0 \quad , \quad \text{d. h.} \quad \varphi_1(x) = B_1 e^{\kappa_N(x-x_1)}$$

bestimmt. Die Größe $A_1(E)$ ist eine (skalierte) Jost-Funktion.

Für den Fall unendlich hoher Wände $V_1 = V_N = \infty$ verschwindet die Wellenfunktion am Rand. Für den rechten Rand gilt

$$\varphi_N(x) = 0 =: A_N \left(e^{-\kappa_N(x-x_{N-1})} - e^{\kappa_N(x-x_{N-1})} \right) \quad , \quad A_N = 1 \quad ,$$

wobei aus rechentechnischen Gründen eine Größe $\kappa_N = \left| \sqrt{2m(\tilde{V}_N - E)/\hbar} \right|$ mit $\tilde{V}_N > E_{\max}$ eingeführt wird. Die Eigenwertbedingung ergibt sich dann aus dem Verschwinden der Wellenfunktion am linken Rand,

$$C(E) := A_1(E) + B_1(E) = 0 \quad .$$

Eine einfache Methode, die Nullstellen der Funktion $C(E)$ zu bestimmen, ist die äquidistante Auswertung der Funktion in einem vorgegebenen Energieintervall $\min(V_\ell, \ell = 1, \dots, N) \leq E_{\min} < E < E_{\max} \leq \min(V_1, V_N)$. Bei Feststellung eines Vorzeichenwechsels wird eine Nullstelle in dem durch den letzten Suchschritt vorgegebenen Intervall mit parabolischer Interpolation gesucht. Dieses Verfahren wird im Programm **IQ** [9] verwendet, wobei auch die Funktion $C(E)$ dargestellt werden kann. Die erforderliche Schrittweite ΔE und damit die Zahl der Suchschritte $(E_{\max} - E_{\min})/\Delta E$ hängen dabei von dem (erwarteten) kleinsten Energieabstand der Eigenfunktionen ab, wenn man an allen Lösungen im vorgegebenen Energieintervall interessiert ist.

Intervalle, in denen sich jeweils genau eine Nullstelle der Funktion $C(E)$ befindet, werden nun dadurch bestimmt, daß die Knoten der sogenannten Schießfunktion $\varphi(x)$, d. h. (hier) der Lösung der Differentialgleichung (B.1) mit einseitig erfüllten Randbedingungen, mit den obigen Randbedingungen gezählt werden. Die Zahl der Knoten wächst monoton mit der Energie, und bei einer Anzahl von M Knoten (Nullstellen) gilt $E_M \leq E < E_{M+1}$.

Bestimmung der Zahl der Nullstellen der Schießfunktion

Die Zählung der Nullstellen (Knoten) N_N erfolgt in einer Schleife über die Bereiche konstanter Potentiale in Richtung wachsender Ortskoordinaten. Mit s_1 bzw. s_2 werden die Vorzeichen der Funktion am linken bzw. rechten Intervallende des jeweils betrachteten Intervalls bezeichnet. Im Falle $V_1 < \infty$ ist $s_1 = \text{sign}(B_1(E))$ anfänglich das asymptotische Vorzeichen der Funktion, das durch den exponentiell fallenden Teil bestimmt wird.

Zu Beginn der Schleife werden zusammenhängende Bereiche mit $E < V_\ell$, $\ell_1 \leq \ell < \ell_2$, zusammengefaßt, weil sich in einem solchen Intervall höchstens ein Knoten befinden kann. Falls mindestens ein solcher Bereich existiert, ist $s_2 := \text{sign}(A_{\ell_2}(E) + B_{\ell_2}(E))$ das Vorzeichen der Funktion am linken Intervallende des nächsten Intervalls mit $E > V_{\ell_2}$. Gilt nun $s_1 s_2 < 0$ oder $s_2 = 0$ (die Funktion verschwindet), so wird N_N um Eins erhöht. Für das Intervall ℓ_2 wird $s_1 := s_2$ und $s_2 := \text{sign}(A_{\ell_2+1}(E) + B_{\ell_2+1}(E))$ gesetzt. Mit $r_Z := (x_\ell - x_{\ell-1})k_{\ell_2}/\pi$ ist $n_Z := \lfloor r_Z \rfloor$ die Zahl der vollen Halbperioden der Winkelfunktion (Lösung in diesem Bereich), um die N_N vergrößert wird. Die Zahl N_N der Nullstellen ist um Eins größer als die der vollen Halbperioden, falls n_Z ungerade und $s_1 s_2 > 0$ oder n_Z gerade und $s_1 s_2 < 0$ ist oder falls $s_2 = 0$ gilt und gleichzeitig $s_1 \neq 0$ oder $s_1 = 0$ und $n_Z = r_Z$. Für $\ell_2 < N - 1$ wird $s_1 := s_2$ gesetzt und zum Beginn der Schleife gesprungen.

Als Variation zu N_N wird der Wert N_N^+ definiert. Dieser unterscheidet sich vom ersteren dadurch, daß eine erste Nullstelle der Funktion für den Fall $E < V(x)$ mit $x < x_{\ell_2}$ für den ersten Schritt oder in der Nähe von x_1 für $E > V_2$ und $V_1 = \infty$ nicht gezählt wird falls sie existiert. Schließlich wird eins zu diesem Ergebnis hinzugezählt. Diese Behandlung liefert für numerisch gefundene Energieeigenwerte die Zählung der Eigenfunktion im Spektrum.

Bestimmung der Eigenwerte

Bei vorgegebenen E_{\min} und E_{\max} ist $N_E = N_N(E_{\max}) - N_N(E_{\min})$ die Zahl der Eigenwerte in diesem Energieintervall, da $N_N(E)$ die Zahl der Eigenwerte angibt, die sich unterhalb von E befinden. Ist $N_E > N_{\max} = 100$, so wird E_{\max} dahingehend verkleinert, daß $N_E = 100$ gilt.

In einem ersten, vorläufigen Schritt wird das Vorzeichen der Funktion $C(E)$ an den Stellen $E(n) = E_{\min} + n(E_{\max} - E_{\min})/(2N_E + 1)$, $0 \leq n \leq 2N_E + 1$, berechnet. Ist $C(E)$ an einer dieser Stellen null, so ist $E(n)$ ein Eigenwert. Gilt $\text{sign}(C(E(n+1))) \text{sign}(C(E(n))) < 0$, so wird eine Nullstelle im Intervall $(E(n), E(n+1))$ bestimmt. Die gefundenen Eigenwerte werden in einem Feld in aufsteigender Reihenfolge gespeichert: $E_1, \dots, E_{N_{\text{FND}}}$. N_{FND} bezeichnet die Anzahl der bereits gefundenen Eigenwerte. Hier und im folgenden wird jeweils nach dem Finden eines Eigenwertes geprüft ob $N_{\text{FND}} = N_E$ gilt. Dieser erste Schritt ist für das Verfahren nicht notwendig, kann es aber beschleunigen.

Im zweiten Schritt werden die Eigenwerte systematisch gesucht, indem zuerst der niedrigste, dann der höchste und anschließend die fehlenden ihrer Reihenfolge entsprechend berechnet werden. Die Energieintervalle (E_a, E_b) , in denen sich nur je ein Eigenwert befindet, werden wie nachfolgend beschrieben durch Intervallhalbierung berechnet. Die Zahl der möglichen Halbierungen wird auf 50 begrenzt; eine Überschreitung führt zum Abbruch der Suche. Es gilt dann $\text{sign}(C(E_a)) \text{sign}(C(E_b)) < 0$, und der Eigenwert wird mittels Nullstellensuche von $C(E)$ ermittelt. Der so gefundene Wert E wird in die bereits bestehende Liste der Eigenwerte eingefügt und N_{FND} um Eins erhöht.

1. Falls in Schritt 1 Eigenwerte gefunden wurden ($N_{\text{FND}} > 0$), wird $N_{\text{N}}^+(E_1)$ berechnet. Ist nun $N_{\text{N}}^+(E_1) > N_{\text{N}}(E_{\text{min}}) + 1$ oder wurden bisher keine Eigenwerte gefunden, wird ein Intervall für E mit $N_{\text{N}}^+(E) = N_{\text{N}}(E_{\text{min}}) + 1$, d. h. E ist der erste Eigenwert über E_{min} , wie folgt durch Intervallhalbierung berechnet:

$E_a := E_{\text{min}}$; falls $N_{\text{FND}} > 0$ dann $E_b := E_1$, sonst $E_b := E_{\text{max}}$. (1) $E_d := (E_a + E_b)/2$; falls $N_{\text{N}}(E_d) = N_{\text{N}}(E_{\text{min}})$ dann $E_a := E_d \rightarrow (1)$; oder falls $N_{\text{N}}^+(E_d) > N_{\text{N}}(E_{\text{min}}) + 1$ dann $E_b := E_d \rightarrow (1)$. Mit $E_b := E_d$ ergibt sich ein ein Intervall (E_a, E_b) .

2. Falls $N_{\text{N}}^+(E_{N_{\text{FND}}}) < N_{\text{N}}(E_{\text{max}})$ wird der Energieeigenwert mit der vorigen Beziehung als Gleichheit gesucht, d. h. der Eigenwert direkt unterhalb von E_{max} . Das Verfahren verläuft entsprechend dem für E_1 .
3. Zur Bestimmung des jeweils niedrigsten, fehlenden Eigenwertes wird zuerst das Energieintervall mit Hilfe der Liste der bereits gefundenen und geordneten Eigenwerte eingeschränkt: $n_l := 1$, $n_h := N_{\text{FND}}$; (2) falls $n_h > n_l + 1$ dann $n_{\text{in}} := (n_l + n_h)/2$, falls $N_{\text{N}}^+(E_{n_{\text{in}}}) > N_{\text{N}}(E_{\text{min}}) + n_{\text{in}}$ dann $n_h := n_{\text{in}}$ sonst $n_l := n_{\text{in}}$; $\rightarrow (2)$. Die Intervallhalbierung beginnt nun mit $E_a := E_{n_l}$, $E_b := E_{n_h}$, an deren Ende $E_{n_l} < E_a \leq E_b < E_{n_h}$ gelten muß. (3) $E_d := (E_a + E_b)/2$. Falls $N_{\text{N}}(E_d) = N_{\text{N}}(E_{\text{min}}) + n_l + 1$ dann $E_b := E_d$, falls $E_a = E_{n_l}$ dann $\rightarrow (3)$; oder falls $N_{\text{N}}(E_d) > N_{\text{N}}(E_{\text{min}}) + n_l$ dann $E_b := E_d$ und $\rightarrow (3)$; sonst $E_a := E_d$, falls $E_b = E_{n_h}$ dann $\rightarrow (3)$.

B.3 Zerlegung gaußscher Wellenpakete

Wir betrachten ein unkorreliertes gaußsches Wellenpaket mit dem Anfangsorts-erwartungswert x_0 , der Breite σ_{x_0} und dem mittleren Impuls $\hbar k_0$,

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}\sqrt{\sigma_{x_0}}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_{x_0}^2} + ik_0(x-x_0)\right) . \quad (\text{B.7})$$

Zur Zerlegung eines solchen Anfangszustands in die Eigenfunktionen eines zu einem Stufenpotential gehörigen Hamilton-Operators müssen sämtliche Überlappintegrale in den relevanten Regionen des Potentials mit der obigen Funktion (B.7)

berechnet werden. In der Region J eines Stufenpotentials ist die vollständige Zerlegung einer Wellenfunktion durch

$$\begin{aligned} \psi_J(x, t) = & \sum_{n=1}^{N_B} \left(\alpha_n^{(J)} e^{ik_n^{(J)}(x-x_{J-1})} + \beta_n^{(J)} e^{-ik_n^{(J)}(x-x_{J-1})} \right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \\ & + \int_{k_{\min}}^{\infty} dk \left(a^{(J)}(k) e^{ik^{(J)}(k)(x-x_{J-1})} + b^{(J)}(k) e^{-ik^{(J)}(k)(x-x_{J-1})} \right) e^{-i\frac{E(k)}{\hbar}t} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

gegeben. Dabei tragen sowohl die gebundenen Zustände (Anzahl N_B) als auch die Kontinuumszustände ($k \geq k_{\min}$) bei, und die Wellenzahl k wird bezüglich des asymptotischen Potentialminimums bestimmt. Wir definieren durch

$$\varphi_{i\pm}(k_l, x) = e^{\pm ik_l(x-x_l)} A_{il\pm}$$

eine Konstituentenfunktion, durch die die Summanden repräsentiert werden können, und berechnen deren Projektionen auf das anfängliche gaußsche Wellenpaket (B.7):

$$\begin{aligned} C_{il\pm} & := \frac{1}{2\pi} \int_{x_{la}}^{x_{lb}} \varphi_{i\pm}^*(k_l, x) \psi_0(x) dx \\ & = \frac{1}{2\pi} A_{il\pm}^* \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi} \sqrt{\sigma_{x0}}} \int_{x_{la}}^{x_{lb}} \exp \left(\mp i k_l^*(x-x_l) - \frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_{x0}^2} + i k_0(x-x_0) \right) dx \\ & = \frac{1}{2\pi} A_{il\pm}^* \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi} \sqrt{\sigma_{x0}}} \exp \left(-i k_0 x_0 \pm i k_l^* x_l - \frac{x_0^2}{4\sigma_{x0}^2} \right) \\ & \quad \times \int_{x_{la}}^{x_{lb}} \exp \left(-\frac{x^2}{4\sigma_{x0}^2} + \left(\frac{x_0}{2\sigma_{x0}^2} + i(k_0 \mp k_l^*) \right) x \right) dx \\ & = \frac{A_{il\pm}^*}{2\pi} \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi} \sqrt{\sigma_{x0}}} \exp \left(-i k_0 x_0 \pm i k_l^* x_l - \frac{x_0^2}{4\sigma_{x0}^2} + \sigma_{x0}^2 \left(\frac{x_0}{2\sigma_{x0}^2} + i(k_0 \mp k_l^*) \right)^2 \right) \\ & \quad \times \int_{x_{la}}^{x_{lb}} \exp \left(-\frac{1}{4\sigma_{x0}^2} \left(x - x_0 - 2i\sigma_{x0}^2(k_0 \mp k_l^*) \right)^2 \right) dx \\ & = \frac{1}{2\pi} A_{il\pm}^* \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi} \sqrt{\sigma_{x0}}} \exp \left(\pm i k_l^*(x_l - x_0) - \sigma_{x0}^2(k_0 \mp k_l^*)^2 \right) \\ & \quad \times \int_{\frac{1}{2\sigma_{x0}}(x_{la}-x_0-2i\sigma_{x0}^2(k_0 \mp k_l^*))}^{\frac{1}{2\sigma_{x0}}(x_{lb}-x_0-2i\sigma_{x0}^2(k_0 \mp k_l^*))} 2\sigma_{x0} \exp(-\xi^2) d\xi \\ & = \frac{1}{2\pi} A_{il\pm}^* \sqrt[4]{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\sigma_{x0}} \exp \left(\pm i k_l^*(x_l - x_0) - \sigma_{x0}^2(k_0 \mp k_l^*)^2 \right) \\ & \quad \times \left[\operatorname{erf} \left(\frac{1}{2\sigma_{x0}}(x_{lb} - x_0 - 2i\sigma_{x0}^2(k_0 \mp k_l^*)) \right) \right. \\ & \quad \left. - \operatorname{erf} \left(\frac{1}{2\sigma_{x0}}(x_{la} - x_0 - 2i\sigma_{x0}^2(k_0 \mp k_l^*)) \right) \right] . \end{aligned}$$

Die auftretenden Funktionen neben Exponentialfunktionen sind Fehlerfunktionen mit komplexem Argument. Diese werden numerisch mittels der CERN-Bibliotheksfunktion [20] ausgewertet. Die exakte Integration in den einzelnen Regionen ist einer numerischen Integration vorzuziehen.

Diskretisierung

Zur Berechnung des Kontinuumsanteils zur Wellenfunktion ist das auftretende Wellenzahlintegral in (B.8) geeignet zu diskretisieren. Ein allgemeiner, approximierender Ausdruck kann in der Form

$$\begin{aligned} \psi_J(x, t) \approx & \sum_{n=1}^{N_B} \left(\alpha_n^{(J)} e^{ik_n^{(J)}(x-x_{J-1})} + \beta_n^{(J)} e^{-ik_n^{(J)}(x-x_{J-1})} \right) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \\ & + \sum_{k_i} \Delta k_i \left(a^{(J)}(k_i) e^{ik^{(J)}(k_i)(x-x_{J-1})} + b^{(J)}(k_i) e^{-ik^{(J)}(k_i)(x-x_{J-1})} \right) e^{-i\frac{E(k_i)}{\hbar}t} \end{aligned}$$

geschrieben werden. Betrachten wir die Phase $\phi = kx - Et/\hbar$ der beitragenden Funktionen, so sollten bei geeignet beschränkten Koordinaten x und Zeiten t die Phasendifferenzen zweier benachbarter Wellenzahlen nicht oberhalb oder in der Größenordnung von 1 (oder π) liegen. Setzen wir $x \rightarrow \Delta x$ und $t \rightarrow \Delta t$, so können die beiden Terme der Phase unabhängig voneinander betrachtet werden. Die Diskretisierungsbedingung lautet daher

$$\Delta k \frac{\partial \phi}{\partial k} \ll \pi \quad \rightarrow \quad \Delta k \Delta x \ll \pi \quad , \quad \frac{\hbar k \Delta k \Delta t}{m} \ll \pi \quad .$$

Wendet man dies auf ein vorgegebenes Intervall $[k_u, k_o]$ an und verwendet in k äquidistante Schritte, so sollte die Anzahl der möglichen Summenterme im Kontinuumsanteil durch die folgenden Relationen nach unten beschränkt werden (\bar{k} : mittlere Wellenzahl):

$$N_k = \frac{k_o - k_u}{\Delta k} \quad \rightarrow \quad N_k \gg \max \left\{ \frac{1}{\pi} (k_o - k_u) \Delta x, \frac{1}{\pi} (k_o - k_u) \frac{\hbar \bar{k}}{m} \Delta t \right\} \quad .$$

B.4 Asymptotische Beiträge an Potentialstufen

Ebenso wie die Entwicklung von Funktionen mit geringer Differenzierbarkeitsordnung nach beliebig oft differenzierbaren Basisfunktionen zu einem langsamen asymptotischen Abfall der Koeffizienten führt, vgl. z. B. die Fourier-Entwicklung, kann dies im umgekehrten Fall, also bei Basisfunktionen mit wenigen existierenden Ableitungen und glatten zu entwickelnden Funktionen, vorkommen. Dieser Fall tritt dann auf, wenn eine glatte Wellenfunktion, z. B. eine Gauß-Funktion, in Eigenfunktionen von Stufenpotentialen entwickelt wird und die Wellenfunktion an den Stufen signifikante Werte und Ableitungen besitzt.

Als einfaches Beispiel eines solchen Falles betrachten wir die Zerlegung trigonometrischer Funktionen in die Eigenfunktionen eines tiefen Kastens der Breite d , der eine Potentialstufe der Höhe V_0 an der Position a , $0 < a < d$, enthält:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & , \quad x < 0 \\ 0 & , \quad 0 \leq x < a \\ V_0 & , \quad a \leq x \leq d \\ \infty & , \quad x > d \end{cases} .$$

Bezeichne k die Wellenzahl im Bereich $V = 0$. Dann gilt für die Wellenzahl k' im Bereich $V = V_0$

$$k'^2 = k^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad , \quad k' = k \sqrt{1 - \frac{2mV_0}{(\hbar k)^2}} \quad ,$$

und die Eigenfunktionen und deren Ableitungen lauten

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \begin{cases} A \sin kx & , \quad 0 \leq x < a \\ B \sin k'(d-x) & , \quad a \leq x \leq d \end{cases} \quad , \\ \varphi'(x) &= \begin{cases} Ak \cos kx & , \quad 0 \leq x < a \\ -Bk' \cos k'(d-x) & , \quad a \leq x \leq d \end{cases} \quad , \end{aligned}$$

wobei Stetigkeitsbedingungen an der Stelle a und eine daraus folgende Eigenwertgleichung gelten:

$$\begin{aligned} A \sin ka &= B \sin k'(d-a) \\ Ak \cos ka &= -Bk' \cos k'(d-a) \quad , \quad \frac{1}{k} \tan ka = -\frac{1}{k'} \tan k'(d-a) \quad . \quad (\text{B.9}) \end{aligned}$$

Im Fall $V_0 = 0$ wird aus der Eigenwertgleichung das übliche Ergebnis $k = n\pi/d$ für die Wellenzahl reproduziert. Für den Fall $V_0 \neq 0$ machen wir einen Ansatz mit einer Verschiebung δk , mit der dann die Wellenzahl k' eine Verschiebung $\delta k'$ erfährt und die in der Potentialregion approximativ angegeben wird:

$$k = \frac{n\pi}{d} + \delta k \quad , \quad k' = \sqrt{k^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \frac{n\pi}{d} + \delta k' \approx \frac{n\pi}{d} + \delta k - \frac{mdV_0}{n\pi\hbar^2} = k - \frac{mdV_0}{n\pi\hbar^2} \quad .$$

In der Approximation für kleine V_0 betrachten wir $\delta k a$ und $\delta k'(d-a)$ als Größen, die klein gegen Eins sind. Die Tangensfunktionen in der Eigenwertgleichung (B.9) werden unter Verwendung des Additionstheorems umgeformt, und für kleine Argumente werden solche Funktionen durch diese ersetzt,

$$\begin{aligned} \tan ka &= \tan \left(\frac{n\pi}{d} a + \delta k a \right) \approx \frac{\tan \left(\frac{n\pi}{d} a \right) + \delta k a}{1 - \delta k a \tan \left(\frac{n\pi}{d} a \right)} \quad , \\ \tan k'(d-a) &= \tan \left(\frac{n\pi}{d} (d-a) + \delta k' (d-a) \right) \\ &\approx \frac{\tan \left(\frac{n\pi}{d} (d-a) \right) + \delta k' (d-a)}{1 - \delta k' (d-a) \tan \left(\frac{n\pi}{d} (d-a) \right)} \quad . \end{aligned}$$

Die approximative Eigenwertgleichung lautet damit

$$0 \approx \frac{1}{\frac{n\pi}{d} + \delta k} \frac{\tan\left(\frac{n\pi}{d}a\right) + \delta k a}{1 - \delta k a \tan\left(\frac{n\pi}{d}a\right)} + \frac{1}{\frac{n\pi}{d} + \delta k - \frac{mdV_0}{n\pi\hbar^2}} \frac{\tan\left(\frac{n\pi}{d}(d-a)\right) + \left(\delta k - \frac{mdV_0}{n\pi\hbar^2}\right)(d-a)}{1 - \left(\delta k - \frac{mdV_0}{n\pi\hbar^2}\right)(d-a) \tan\left(\frac{n\pi}{d}(d-a)\right)} .$$

Diese Gleichung wird mit dem Hauptnenner multipliziert und nach den verschiedenen Ordnungen innerhalb der Approximation gruppiert und zu Null gesetzt. Die 0. Ordnung spiegelt den ungestörten Fall wider,

$$0 = \frac{n\pi}{d} \left[\tan\left(\frac{n\pi}{d}a\right) + \tan\left(\frac{n\pi}{d}(d-a)\right) \right] ;$$

der Term ist proportional zu $\tan n\pi = 0$. Die 1. Ordnung ergibt umgeformt

$$0 = n\pi \left[\left(\delta k - \frac{mdV_0}{n\pi\hbar^2} \frac{d-a}{d} \right) \left(1 - \tan\left(\frac{n\pi}{d}a\right) \tan\left(\frac{n\pi}{d}(d-a)\right) \right) - \frac{mdV_0}{n^2\pi^2\hbar^2} \tan\left(\frac{n\pi}{d}a\right) \right] .$$

Die asymptotische Lösung, d. h. $n \rightarrow \infty$, dieser Gleichung ergibt für die Wellenzahl k

$$\delta k = \frac{mV_0}{n\pi\hbar^2}(d-a) \quad , \quad k = \frac{n\pi}{d} + \frac{mV_0}{n\pi\hbar^2}(d-a) .$$

Die Wellenzahl k' im Potentialbereich sowie die Energie $E(k)$ lauten in niedrigster Ordnung

$$k' \approx \frac{n\pi}{d} - \frac{mV_0}{n\pi\hbar^2}a \quad , \quad E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2\pi^2}{d^2} + \frac{d-a}{d}V_0 \quad ,$$

in Übereinstimmung mit der niedrigsten Ordnung der Störungstheorie. Aus den Stetigkeitsbedingungen (B.9) folgt mit den zuvor angegebenen Wellenzahlen für den Koeffizienten B in Abhängigkeit von A

$$B = A \frac{\sin k'(d-a)}{\sin ka} \approx (-1)^{n+1} A$$

in dieser Näherung. Das Normierungsintegral des Zustands folgt aus

$$\begin{aligned} N &= A^2 \int_0^a \sin^2(kx) dx + B^2 \int_a^d \sin^2(k'(d-x)) dx \\ &= A^2 \left(\frac{d}{2} - \frac{1}{4k} \sin(2ka) - \frac{1}{4k'} \sin(2k'(d-a)) \right) . \end{aligned}$$

Mit den Approximationen

$$\begin{aligned}\sin(2ka) &\approx \sin\left(\frac{2n\pi}{d}a\right) + \frac{2mV_0}{n\pi\hbar^2}a(d-a)\cos\left(\frac{2n\pi}{d}a\right) \quad , \\ \sin(2k'(d-a)) &\approx -\sin\left(\frac{2n\pi}{d}a\right) - \frac{2mV_0}{n\pi\hbar^2}a(d-a)\cos\left(\frac{2n\pi}{d}a\right) \quad , \\ \frac{1}{k} &\approx \frac{1}{\frac{n\pi}{d}}\left(1 - \frac{mV_0d}{n^2\pi^2\hbar^2}(d-a)\right) \quad , \\ \frac{1}{k'} &\approx \frac{1}{\frac{n\pi}{d}}\left(1 + \frac{mV_0d}{n^2\pi^2\hbar^2}a\right)\end{aligned}$$

erhält man den asymptotischen Normierungsfaktor zu

$$N \approx A^2 \frac{d}{2} \quad ,$$

die Abweichungen vom ungestörten System mit $V_0 = 0$ gehen in der Normierung mit höchstens $\sim 1/n^2$ ein.

Schließlich werden die Projektionen des ungestörten Zustands

$$\varphi_n^{(0)}(x) = A_n^{(0)} \sin k_n^{(0)}x \quad , \quad k_n^{(0)} = \frac{n\pi}{d} \quad ,$$

auf die obigen asymptotischen Basiszustände des Systems mit $V_0 \neq 0$ berechnet. In den beiden Teilbereichen ergibt sich

$$\begin{aligned}a_{n'n}^{(1)} &= A_{n'}^{(0)} A_n \int_0^a \sin\left(\frac{n'\pi}{d}x\right) \sin(k_n x) dx \\ &= A_{n'}^{(0)} A_n \left(\frac{\sin\left[\left(\frac{n'\pi}{d} - k_n\right)a\right]}{2\left(\frac{n'\pi}{d} - k_n\right)} - \frac{\sin\left[\left(\frac{n'\pi}{d} + k_n\right)a\right]}{2\left(\frac{n'\pi}{d} + k_n\right)} \right) \quad , \\ a_{n'n}^{(2)} &= A_{n'}^{(0)} B_n \int_a^d \sin\left(\frac{n'\pi}{d}x\right) \sin(k'_n(d-x)) dx \\ &= (-1)^{n'+1} A_{n'}^{(0)} B_n \left(\frac{\sin\left[\left(\frac{n'\pi}{d} - k'_n\right)(d-a)\right]}{2\left(\frac{n'\pi}{d} - k'_n\right)} - \frac{\sin\left[\left(\frac{n'\pi}{d} + k'_n\right)(d-a)\right]}{2\left(\frac{n'\pi}{d} + k'_n\right)} \right) \quad ,\end{aligned}$$

mit den Abkürzungen $B_n = (-1)^{n+1}A_n$, $A_{n'} \approx A_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{d}}$, $k_n \approx \frac{n\pi}{d} + \frac{mV_0}{n\pi\hbar^2}(d-a)$, $k'_n \approx \frac{n\pi}{d} - \frac{mV_0}{n\pi\hbar^2}a$. Umformungen wie oben führen auf den Ausdruck

$$a_{n'n} \approx \frac{4mV_0a(d-a)}{n^2\pi^2\hbar^2} \sin \frac{n'\pi a}{d} \sin \frac{n\pi a}{d}$$

für die asymptotischen Entwicklungskoeffizienten ($n \gg n'$), d. h. bei großen Quantenzahlen fallen die Koeffizienten (bzw. deren Einhüllende) ab wie $1/n^2$, also wie $1/k^2$ oder $1/E$. Dieses Verhalten ist allgemein zu erwarten, wenn das Potential Sprungstellen besitzt, auch im Fall eines kontinuierlichen Spektrums.

Anhang C

Parametrische Oszillation und Gauß-Pakete

Im Rahmen der Frage der Veränderbarkeit reiner Zustände und deren Wigner-Funktionen durch Potentiale diskutieren wir hier den einfachen Fall der Änderung der Parameter von gaußschen Wellenpaketen unter zeitveränderlichen Potentialparametern eines harmonischen Oszillators.

C.1 Quantenmechanische Behandlung

Wir betrachten die Zeitentwicklung eines eindimensionalen gaußschen Wellenpakets unter dem Einfluß einer zeitabhängigen konstanten Kraft mit zeitlich veränderlicher Oszillatorstärke. Die Hamilton-Funktion schreibt sich in diesem Fall als

$$H = \frac{p^2}{2m} - mxg(t) + \frac{k + \kappa(t)}{2}x^2 \quad .$$

Die klassischen Hamiltonschen Gleichungen lauten

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} = \dot{x} \quad , \quad \frac{\partial H}{\partial x} = -mg(t) + (k + \kappa(t))x = -\dot{p} \quad ,$$

woraus sich direkt die klassische Bewegungsgleichung

$$\ddot{x} + \frac{k + \kappa(t)}{m}x - g(t) = 0$$

ergibt. Für die Schrödinger-Gleichung $\hat{H}\psi = i\hbar\dot{\psi}$ wählen wir einen Ansatz in Form der Gauß-Funktion

$$\psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}\sqrt{\sigma_x(t)}} \exp\left(-\frac{(x - x_s(t))^2}{4\sigma_x^2(t)} + i\varphi(t, x)\right) \quad . \quad (\text{C.1})$$

Dies führt auf gekoppelte Differentialgleichungen für die eingesetzten Funktionen,

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{x - x_s(t)}{2\sigma_x^2(t)} \right)^2 - \left(\frac{\partial\varphi(t,x)}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{2\sigma_x^2(t)} \right] + \frac{k + \kappa(t)}{2} x^2 - mxg(t) \\
& = -\hbar \frac{\partial\varphi(t,x)}{\partial t} \quad , \\
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{x - x_s(t)}{\sigma_x^2(t)} \frac{\partial\varphi(t,x)}{\partial x} + \frac{\partial^2\varphi(t,x)}{\partial x^2} \right] \\
& = \hbar \left[-\frac{\dot{\sigma}_x(t)}{2\sigma_x(t)} + \frac{(x - x_s(t))^2}{2\sigma_x^3(t)} \dot{\sigma}_x(t) + \frac{x - x_s(t)}{2\sigma_x^2(t)} \dot{x}_s(t) \right] \quad .
\end{aligned}$$

Für $\varphi(t,x)$ bietet sich der im Ort x quadratische Ansatz

$$\varphi(t,x) = \alpha(t)x^2 + \beta(t)x + \gamma(t)$$

an, woraus durch Koeffizientenvergleich die sechs gekoppelten gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$\begin{aligned}
(1) \quad & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{4\sigma_x^4(t)} - 4\alpha^2(t) \right] + \frac{k + \kappa(t)}{2} = -\hbar\dot{\alpha}(t) \quad , \\
(2) \quad & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{x_s(t)}{4\sigma_x^4(t)} - 4\alpha(t)\beta(t) \right] - mg(t) = -\hbar\dot{\beta}(t) \quad , \\
(3) \quad & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{x_s^2(t)}{4\sigma_x^4(t)} - \beta^2(t) - \frac{1}{2\sigma_x^2(t)} \right] = -\hbar\dot{\gamma}(t) \quad , \\
(4) \quad & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{2\alpha(t)}{\sigma_x^2(t)} \right] = \hbar \left[\frac{\dot{\sigma}_x(t)}{2\sigma_x^3(t)} \right] \quad , \\
(5) \quad & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{\beta(t)}{\sigma_x^2(t)} + \frac{2\alpha(t)x_s(t)}{\sigma_x^2(t)} \right] = \hbar \left[-\frac{x_s(t)\dot{\sigma}_x(t)}{\sigma_x^3(t)} + \frac{\dot{x}_s(t)}{2\sigma_x^2(t)} \right] \quad , \\
(6) \quad & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\beta(t)x_s(t)}{\sigma_x^2(t)} + 2\alpha(t) \right] = \hbar \left[-\frac{\dot{\sigma}_x(t)}{2\sigma_x(t)} + \frac{x_s^2(t)\dot{\sigma}_x(t)}{2\sigma_x^3(t)} - \frac{x_s(t)\dot{x}_s(t)}{2\sigma_x^2(t)} \right]
\end{aligned}$$

folgen.

Mit den Gleichungen (4) und (5) können $\alpha(t)$ und $\beta(t)$ durch die Parameterfunktionen der Gauß-Funktion ersetzt werden,

$$\alpha(t) = \frac{m \dot{\sigma}_x(t)}{2\hbar \sigma_x(t)} \quad , \quad \beta(t) = \frac{m}{\hbar} \left(\dot{x}_s(t) - \frac{\dot{\sigma}_x(t)}{\sigma_x(t)} x_s(t) \right) \quad .$$

Gleichung (6) ist damit automatisch erfüllt. Aus Gleichung (3) ergibt sich die Zeitableitung der globalen zeitabhängigen Phase $\gamma(t)$ zu

$$\dot{\gamma}(t) = \frac{\hbar}{2m} \left[\frac{x_s^2(t)}{4\sigma_x^4(t)} - \frac{1}{2\sigma_x^2(t)} - \frac{m^2}{\hbar^2} \left(\dot{x}_s(t) - \frac{\dot{\sigma}_x(t)}{\sigma_x(t)} x_s(t) \right)^2 \right] \quad .$$

Eine Differentialgleichung 2. Ordnung für die Breite $\sigma_x(t)$ erhält man aus Gleichung (1),

$$\ddot{\sigma}_x(t) + \frac{k + \kappa(t)}{m} \sigma_x(t) - \frac{\hbar^2}{4m^2} \frac{1}{\sigma_x^3(t)} = 0 \quad . \quad (\text{C.2})$$

Mit dieser ergibt sich schließlich unter Verwendung von Gleichung (2) die Differentialgleichung 2. Ordnung

$$m\ddot{x}_s(t) + (k + \kappa(t))x_s(t) - mg(t) = 0 \quad (\text{C.3})$$

für die Schwerpunktskoordinate des Wellenpakets, welche die Bewegung in klassischer Form beschreibt.

Die Gleichung (C.2) für die Breite ist die der Radialkoordinate eines klassischen Teilchens in einem Oszillatorpotential mit dem (klassischen) Bahndrehimpuls $\hbar/2$. Im Falle konstanter Oszillatorstärke ($\kappa(t) = 0$) kann sie direkt integriert werden. Das erste Integral ergibt

$$c_\sigma = \dot{\sigma}_x^2(t) + \frac{k}{m} \sigma_x^2(t) + \frac{\hbar^2}{4m^2} \frac{1}{\sigma_x^2(t)} = \text{const} \quad , \quad \kappa(t) = 0 \quad .$$

Die zweite Integration (mit [26] 2.261) mit Umstellung nach $\sigma_x^2(t)$ unter Verwendung der Bezeichnung $\Delta_\sigma = \hbar^2 k/m^3 - c_\sigma^2 < 0$ liefert für die zeitabhängige, periodisch mit doppelter Frequenz variierende Breite eines gequetschten Zustands

$$\sigma_x^2(t) = \frac{m}{2k} \left\{ c_\sigma + \sqrt{-\Delta_\sigma} \sin \left[2\sqrt{\frac{k}{m}}(t - t_0) + \arcsin \left(\frac{\frac{2k}{m}\sigma_x^2(t_0) - c_\sigma}{\sqrt{-\Delta_\sigma}} \right) \right] \right\} \quad . \quad (\text{C.4})$$

C.2 Wigner-Funktion

Die Wigner-Funktion (2.18) des Gauß-Pakets (C.1) ergibt sich zu

$$\begin{aligned} W(x, p, t) &= \\ &= \frac{1}{\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{(x - x_s(t))^2}{2\sigma_x^2(t)} - \frac{2\sigma_x^2(t)}{\hbar^2} \left[p - m \left(\frac{\dot{\sigma}_x(t)}{\sigma_x(t)}(x - x_s(t)) + \dot{x}_s(t) \right) \right]^2 \right\} \quad , \end{aligned}$$

einer zweidimensionalen Gauß-Funktion, die im klassischen Phasenraum für gleich gewählte Parameter eine identische Situation beschreibt. Die Verwendung der Standardform der Gauß-Verteilung wie in Abschnitt 2.4 mit Orts- und Impulsbreite $\sigma_x(t)$, $\sigma_p(t)$ und der Korrelation $\rho(t)$,

$$W(x, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{1}{1 - \rho^2(t)} B(x, p, t) \right) \quad ,$$

$$B(x, p, t) = \frac{(x - x_s(t))^2}{\sigma_x^2(t)} - \frac{2\rho(t)(x - x_s(t))(p - m\dot{x}_s(t))}{\sigma_x(t)\sigma_p(t)} + \frac{(p - m\dot{x}_s(t))^2}{\sigma_p^2(t)} ,$$

führt auf die Größen

$$\sigma_p^2(t) = \frac{\hbar^2}{4\sigma_x^2(t)} \left(1 + \frac{4m^2}{\hbar^2} \sigma_x^2(t) \dot{\sigma}_x^2(t) \right) , \quad \rho(t) = \frac{\frac{2m}{\hbar} \sigma_x(t) \dot{\sigma}_x(t)}{\sqrt{1 + \frac{4m^2}{\hbar^2} \sigma_x^2(t) \dot{\sigma}_x^2(t)}} .$$

C.3 Änderung der Breite eines Pakets

Das Verhalten der Breite eines gaußschen Pakets wird durch die Differentialgleichung (C.2) beschrieben. Ein Paket habe anfänglich ($t \leq 0$) konstante Breite, befinde sich also in einem kohärenten Zustand. Damit gilt $\dot{\sigma}_x(t) = 0$ und folglich $\sigma_x^2(t) = \hbar/(2\sqrt{km}) = \sigma_x^2(0)$.

In einem Zeitintervall $0 < t < t_c$ werde die Oszillatorstärke um den konstanten Wert κ_c auf $k_c = k + \kappa_c$ verändert. Mit diesen Parametern und Anfangswerten lauten die Parameter der Lösung (C.4)

$$c_\sigma = \frac{\hbar}{2m} \sqrt{\frac{k}{m}} \left(1 + \frac{\kappa_c}{k} \right) , \quad \Delta_\sigma = -\frac{\hbar^2}{4m^3} \frac{\kappa_c^2}{k} ,$$

welche damit die Form

$$\sigma_x^2(t) = \sigma_x^2(0) \left\{ 1 + \frac{\kappa_c}{2k} \left[1 - \cos \left(2\sqrt{\frac{k + \kappa_c}{m}} t \right) \right] \right\} \quad (C.5)$$

annimmt.

Zum Zeitpunkt t_c werde die Oszillatorstärke auf k' geändert. Das weitere Verhalten der Breite wird durch ihren Wert und ihre Zeitableitung bei t_c bestimmt. Der Zustand wird für $t \geq t_c$ kohärent, wenn $\sigma_x^2(t_c) = \hbar/(2\sqrt{k'm})$ und $\dot{\sigma}_x(t_c) = 0$ gilt, und letztere Bedingung wird erfüllt, wenn $\sigma_x^2(t_c)$ hier ein Extremum der Lösung (C.5) darstellt. Damit ist (z. B.)

$$\sigma_x^2(t_c) = \sigma_x^2(0) \left(1 + \frac{\kappa_c}{k} \right) , \quad t_c = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{m}{k + \kappa_c}} ; \quad \sigma_x^2(t_c) = \frac{\hbar}{2\sqrt{k'm}} .$$

Werden beispielsweise k und k' vorgegeben, so ist

$$k_c = k \sqrt{\frac{k}{k'}} \quad \text{bzw.} \quad \kappa_c = k \left(\sqrt{\frac{k}{k'}} - 1 \right)$$

zu wählen.

Eine Variation der Breiten kohärenter Zustände wird hier über intermediäre gequetschte Zustände erreicht. Die einzige Änderung der Breiten ausschließlich über kohärente Zustände führt zu einer linearen Zeitabhängigkeit der Breite, $\sigma_x(t) = \sigma_{x0} + \dot{\sigma}_{x0}t$, mit der variablen Oszillatorstärke $k(t) = \hbar^2/(4m\sigma_x^2(t))$. Andere als sprunghafte Übergänge in k können ebenfalls gewählt werden, wenn $\dot{\sigma}_x(t)$ zum betrachteten Endzeitpunkt der Variation in k verschwindet.

Zusammenfassung

Die Frage der Geschwindigkeit des Signaltransports ist für die Funktion moderner elektronischer und optoelektronischer Bauelemente und Schaltkreise von besonderer Bedeutung. In der wissenschaftlichen Literatur werden Phänomene instantanen Signaltransports durch den Tunneleffekt in quantenmechanischen Vorgängen und Überlichtgeschwindigkeiten bei der Ausbreitung von elektromagnetischen Signalen ohne scharfe Wellenfront durch Evaneszenz in dielektrischen Materialien behauptet.

In dieser Arbeit wird eine auf einer genauen Analyse des Nachweises von Signalankunftszeiten beruhende Quantildefinition der Geschwindigkeit angegeben – obige Behauptungen hingegen beziehen sich auf unphysikalische Geschwindigkeitsdefinitionen. Sie stützt sich auf die Forderung, daß endliche Beträge der zum Nachweis verwendeten physikalischen Größe in einem Detektor deponiert worden sein müssen. Die physikalische Größe muß erhalten und durch eine positiv definite Dichte beschrieben sein. Als Beispiele für solche Größen seien Wahrscheinlichkeit, Energie, Masse, Ladungen eines Vorzeichens genannt.

Werden die Dichte und Stromdichte einer positiv definiten Erhaltungsgröße mit $\varrho(t, \vec{r})$, $\varrho(t, \vec{r}) \geq 0$, und $\vec{j}(t, \vec{r})$ beschrieben, die die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \varrho(t, \vec{r})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(t, \vec{r}) = 0$$

erfüllen, so ist die Quantilgeschwindigkeit des Signals durch

$$\vec{v}(t, \vec{r}) = \frac{\vec{j}(t, \vec{r})}{\varrho(t, \vec{r})}$$

gegeben. Die zugehörige Ankunftszeit $t(\vec{r})$ eines Signals am Ort \vec{r} , welche auf einer Anfangsfläche vorgegeben wird, ist dann durch die partielle Differentialgleichung

$$\vec{j}(t, \vec{r}) \cdot \vec{\nabla} t(\vec{r}) = \varrho(t, \vec{r})$$

bestimmt. Die zugehörigen Charakteristiken $\vec{r}_c(t)$ werden durch die Hamilton–Jacobi-Differentialgleichungen

$$\frac{d\vec{r}_c(t)}{dt} = \vec{v}(t, \vec{r}_c(t))$$

beschrieben.

Die so eingeführte Signaldefinition schließt als Grenzfall das von Arnold Sommerfeld untersuchte elektromagnetische Signal mit scharfer Front in optischen Medien mit anomaler Dispersion ein. Die in der Literatur gebräuchliche Definition der Gruppengeschwindigkeit erweist sich als eine nur in einer eingeschränkten Menge von Systemen brauchbare Näherung. Wie schon von Wilhelm Wien bemerkt, führt sie u. a. auf Überlichtgeschwindigkeiten in Medien mit anomaler Dispersion.

Die Stromlinien bzw. Charakteristiken $\vec{r}_c(t)$ transformieren eine Anfangsfläche in der Zeit, wobei die durch die Flächen bis zum jeweiligen Zeitpunkt $t(\vec{r})$ geflossene integrierte Menge der physikalischen Größe konstant bleibt. Die Übertragung einer Segmentierung bzw. Parametrisierung der Anfangsfläche zu späteren Zeiten auf die transformierte Fläche erfolgt entlang sogenannter Detektorverbindungskurven, die als zweiter Satz von Kurven (neben den Stromlinien) die Flächen miteinander verbinden. Entlang dieser Kurven verlaufen die Flußröhren der zeitintegrierten Stromdichte. Die Detektorverbindungskurven verlaufen im allgemeinen nicht kausal, d. h. auch zeitinvertiert. Deren Lösung ist an die Ankunftszeitfunktion $t(\vec{r})$ bzw. an die Stromlinien $\vec{r}_c(t)$ gekoppelt.

Mit der in der Arbeit angegebenen Quantildefinition der Geschwindigkeit erhalten die Bohmschen Trajektorien der Quantenmechanik eine wahrscheinlichkeitstheoretische Interpretation als Quantiltrajektorien. Als Beispiele werden das zweidimensionale gaußsche Wellenpaket der Quantenmechanik und die Abstrahlung von einem elektromagnetischen Dipol untersucht. Eine genaue Untersuchung der Form der zugehörigen Trajektorien und Detektorverbindungskurven wird mit erheblichem Rechenaufwand vorgenommen. Im Fall des quantenmechanischen Gauß-Pakets ist die zum Nachweis benutzte physikalische Größe insbesondere die Wahrscheinlichkeit, im Fall der Dipolabstrahlung die elektromagnetische Energie.

Über diese Untersuchung des Transports mit positiv definiter Dichte der Nachweisgröße hinaus wird dann die Wignersche Phasenraumdicke der Quantenmechanik untersucht. Sie ist zwar nicht positiv definit, jedoch verletzt sie die Definitheit nur in Phasenraumvolumina, die für eindimensionale Systeme kleiner als das Plancksche Wirkungsquantum h sind. In diesen Bereichen tritt Signalausbreitung mit Zeitinversion auf.

Dabei wird zunächst der klassische Phasenraum betrachtet, sowohl für Hamiltonsche Systeme wie auch in allgemeinerer Form. Die Bewegungsgleichungen können im letzteren Fall über die Stromdichte definiert werden, welche die Geschwindigkeit bestimmt.

Für die Quantenmechanik wird die zur Wigner-Verteilung gehörige Stromdichte sorgfältig diskutiert und begründet. Von der Vielzahl der möglichen Eichungen der Stromdichte wird diejenige verwendet, die $\dot{x} = p/m$ als eine Bewegungsgleichung beinhaltet. Die Lösung der Bewegungsgleichungen liefert die Phasenraumtrajektorien bzw. Flußlinien in einer hydrodynamischen Interpretation.

Die Wigner-Verteilungen und -Ströme werden zu einer Reihe von Beispielen numerisch berechnet, graphisch veranschaulicht und analysiert, insbesondere bezüglich der Lagen negativer Bereiche. Anschließend werden die zu den Verteilungen und Strömen gehörigen Trajektorien bestimmt und dargestellt. Die Beispiele umfassen Eigenzustände und Wellenpakete im tiefen Kasten wie die Streuung an repulsiver und attraktiver Einfachbarriere und die Streuung an einer repulsiven Doppelbarriere. Die Wellenpakete besitzen anfänglich gaußsche Form. Sie werden in die Eigenfunktionen des jeweiligen Stufenpotentials zerlegt, welche wiederum vorher numerisch bestimmt werden.

Für die Eigenzustände im tiefen Kasten werden die Trajektorien klassifiziert und dabei unterschieden in solche, die nur in positiven Bereichen ähnlich klassischer Phasenraumbahnen laufen, und solche, die nur quantenmechanisch möglich sind. Die Abbildung eines kleinen Gebietes unter den Trajektorien nach einer Reflexion an einer Wand führt zu deutlichen Verzerrungen, wohingegen eine ähnliche Abbildung mit den Trajektorien eines Wellenpakets ein fast klassisches Verhalten zeigt.

Schließlich werden für die Streuung von Wellenpaketen an Potentialbarrieren die jeweiligen Teile des ursprünglichen Pakets bestimmt, die nach der Streuung im transmittierten oder reflektierten Teil verlaufen. Für Einfachbarrieren mit etwa zur Hälfte geteilten Phasenraumgehalten werden vornehmlich Teile mit großen Impulsen transmittiert und mit kleinen reflektiert. Bei der Resonanzstreuung an einer Doppelbarriere besteht der transmittierte Teil aus einem nicht klar abgegrenzten Bereich aus dem hinteren Teil des ursprünglichen Pakets.

Literaturverzeichnis

- [1] BERNDL, K.: *Global existence and uniqueness of Bohmian trajectories*. In: CUSHING, J. T., A. FINE und S. GOLDSTEIN (Hrsg.): *Bohmian Mechanics and Quantum Theory: An Appraisal*. Kluwer, Dordrecht, 1996.
- [2] BERNDL, K., D. DÜRR, S. GOLDSTEIN, G. PERUZZI und N. ZANGHI: *On the Global Existence of Bohmian Mechanics*. *Communications in Mathematical Physics*, 173:647–673, 1995.
- [3] BOHM, D.: *A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of “Hidden” Variables. I*. *Phys. Rev.*, 85:166–179, 1952.
- [4] BOHM, D.: *A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of “Hidden” Variables. II*. *Phys. Rev.*, 85:180–193, 1952.
- [5] BRANDT, S.: *Data Analysis*. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [6] BRANDT, S. und H. D. DAHMEN: *The Picture Book of Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, New York, 2001.
- [7] BRANDT, S. und H. D. DAHMEN: *Elektrodynamik*. Springer-Verlag, Berlin, 4. Aufl., 2005.
- [8] BRANDT, S., H. D. DAHMEN, E. GJONAJ und T. STROH: *Quantile motion and tunneling*. *Physics Letters A*, 249:265–270, 1998.
- [9] BRANDT, S., H. D. DAHMEN und T. STROH: *Interactive Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, New York, 2003.
- [10] CHABANOV, V. M., B. N. ZAKHARIEV, S. BRANDT, H. D. DAHMEN und T. STROH: *Effective disappearance of degenerating energy levels*. *Physical Review A*, 52:R3389, 1995.
- [11] CHRUŚCIŃSKI, D. und K. MŁODAWSKI: *Wigner function and Schrödinger equation in phase-space representation*. *Physical Review A*, 71:052104, 2005.
- [12] COHEN, L.: *Generalized Phase-Space Distribution Functions*. *Journal of Mathematical Physics*, 7:781–786, 1966.

- [13] COURANT, R. und D. HILBERT: *2. Partial differential equations*. Methods of mathematical physics. Wiley, New York, 1953.
- [14] CURTRIGHT, T. und C. ZACHOS: *Wigner trajectory characteristics in phase space and field theory*. Journal of Physics: Math. Gen., 32:771–779, 1999.
- [15] DAHMEN, H. D. und E. GJONAJ: *Wellenprozesse und Kausalität – Eine Untersuchung von elektromagnetischen Signalen in Hohlleitern variablen Querschnitts*. In: HÖHLER, G. und H. M. STAUDENMAIER (Hrsg.): *Beiträge des XI. Computerworkshops in Halle vom 3. bis 5. Oktober 1996*, Nr. 8 in *Computer Theoretikum und Praktikum für Physiker*, S. 32–48. Fachinformationszentrum Karlsruhe, Karlsruhe, 1996.
- [16] DAHMEN, H. D., E. GJONAJ und T. STROH: *Quantile motion of electromagnetic waves in wave guides of varying cross section and dispersive media*. In: MITTELSTAEDT, P. und G. NIMTZ (Hrsg.): *Superluminal(?) Velocities: Tunneling time, barrier penetration, non-trivial vacua, philosophy of physics*, Nr. 7 in *Annalen der Physik*, S. 645–653, Leipzig, 1998. DPG, Wiley-VCH.
- [17] DEOTTO, E. und G. C. GHIRARDI: *Bohmian Mechanics Revisited*. Foundations of Physics, 28:1–30, 1998.
- [18] DIAS, N. C. und J. N. PRATA: *Causal interpretation and quantum phase space*. Physics Letters A, 291:355–366, 2001.
- [19] DIAS, N. C. und J. N. PRATA: *Bohmian trajectories and quantum phase space distributions*. Physics Letters A, 302:261–272, 2002.
- [20] ERSKINE, G. A.: *Error Function and Complementary Error Function*. CERN Program Library: Program Documentation C300, CERN, Juli 1992.
- [21] FLIESSBACH, T.: *Mechanik*. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 4. Aufl., 2003.
- [22] FREYBERGER, M., P. BARDROFF, C. LEICHTLE, G. SCHRADER und W. SCHLEICH: *The art of measuring quantum states*. Physics World, 11:41–45, 1997.
- [23] GHOSE, P., A. S. MAJUMDAR, S. GUHA und J. SAU: *Bohmian trajectories for photons*. Physics Letters A, 290:205–213, 2001.
- [24] GJONAJ, E.: *Quantilbewegung und Kausalität – Tunnelzeiten und -geschwindigkeiten beim quantenmechanischen Tunneleffekt und bei der Ausbreitung elektromagnetischer Signale in dispersiven Medien und Hohlleitern*. PhD Dissertation, Universität Siegen, Fachbereich Physik, 1998.

- [25] GONG, J. und P. BRUMER: *Chaos and quantum-classical correspondence via phase-space distribution functions*. Physical Review A, 68:062103, 2003.
- [26] GRADSHTEYN, I. S. und I. M. RYZHIK: *Table of integrals, series, and products*. Academic Press, New York, 4. Aufl., 1980.
- [27] GRØNAGER, M. und N. E. HENRIKSEN: *Quantum dynamics via a time propagator in Wigner's phase space*. Journal of Chemical Physics, 102:5387–5395, 1994.
- [28] HELLER, E. J.: *Wigner phase space method: Analysis for semiclassical applications*. Journal of Chemical Physics, 65:1289–1298, 1976.
- [29] HENRIKSEN, N. E., G. D. BILLING und F. Y. HANSEN: *Phase space representation of quantum mechanics: Approximate dynamics of the Morse oscillator*. Chemical Physics Letters, 149:397–403, 1988.
- [30] HESS, J.: *Signalausbreitung in der Klein–Gordon-Theorie und das Hegerfeldt-Paradoxon*. Diplomarbeit, Universität–Gesamthochschule Siegen, 1998.
- [31] HILLERY, M., R. F. O'CONNEL, M. O. SCULLY und E. P. WIGNER: *Distribution functions in physics: Fundamentals*. Physics Reports, 106:121–167, 1984.
- [32] HOLLAND, P. R.: *The Quantum Theory of Motion*. Cambridge University Press, 1993.
- [33] HUDSON, R. L.: *When is the Wigner quasi-probability density non-negative?* Reports on Mathematical Physics, 6:249–252, 1974.
- [34] JACKSON, J. D.: *Klassische Elektrodynamik*. de Gruyter, Berlin, 3. Aufl., 2002.
- [35] KARK, K. W.: *Wie schnell ist schnell? Geschwindigkeitsdefinition bei der Übertragung von Signalen*. Frequenz, 53:226–232, 1999.
- [36] KÖLBIG, K. S.: *Adaptive Gaussian Quadrature*. CERN Program Library: Program Documentation D103, CERN, März 1993.
- [37] KÖLBIG, K. S.: *Exponential Integral for Complex Argument*. CERN Program Library: Program Documentation C338, CERN, März 1993.
- [38] KÖLBIG, K. S.: *Minimum of a Function of One Variable*. CERN Program Library: Program Documentation D503, CERN, Nov. 1993.
- [39] KÖLBIG, K. S.: *First-order Differential Equations (Runge–Kutta–Merson)*. CERN Program Library: Program Documentation D202, CERN, Feb. 1994.

- [40] KÖLBIG, K. S.: *Numerical Differentiation*. CERN Program Library: Program Documentation D401, CERN, Dez. 1994.
- [41] KÖLBIG, K. S.: *Zero of a Function of One Real Variable*. CERN Program Library: Program Documentation C200, CERN, Dez. 1994.
- [42] LEE, H.-W.: *Theory and application of the quantum phase-space distribution functions*. Physics Reports, 259:147–211, 1995.
- [43] LEE, H.-W. und M. O. SCULLY: *Wigner phase-space description of a Morse oscillator*. Journal of Chemical Physics, 77:4604–4610, 1982.
- [44] LEE, H.-W. und M. O. SCULLY: *The Wigner Phase-Space Description of Collision Processes*. Foundations of Physics, 13:61, 1983.
- [45] MADDOX, J. B. und E. R. BITTNER: *Quantum relaxation dynamics using Bohmian trajectories*. Journal of Chemical Physics, 115:6309–6316, 2001.
- [46] MADELUNG, E.: *Quantentheorie in hydrodynamischer Form*. Zeitschrift für Physik, 40:322, 1926.
- [47] MESSIAH, A.: *Quantum Mechanics*. Wiley, New York, 1961.
- [48] MUGA, J. G., R. SALA und R. F. SNIDER: *Comparison of Classical and Quantal Evolution of Phase Space Distribution Functions*. Physica Scripta, 47:732–739, 1993.
- [49] POLAVIEJA, G. G. DE: *A causal theory in phase space*. Physics Letters A, 220:303–314, 1996.
- [50] RAZAVY, M.: *Wigner trajectories in quantum tunneling*. Physics Letters A, 212:119–122, 1995.
- [51] SALA, R., S. BROUARD und J. G. MUGA: *Wigner trajectories and Liouville's theorem*. Journal of Chemical Physics, 99:2708–2714, 1993.
- [52] SALA, R., S. BROUARD und J. G. MUGA: *The influence functional: application to tunneling*. Journal of Physics: Math. Gen., 28:6233–6244, 1995.
- [53] SCHLEICH, W. P.: *Quantum Optics in Phase Space*. Wiley-VCH, Berlin, 2001.
- [54] SKODJE, R. T., H. W. ROHRS und J. VANBUSKIRK: *Flux analysis, the correspondence principle, and the structure of quantum phase space*. Physical Review A, 40:2894–2916, 1989.
- [55] SOMMERFELD, A.: *Elektrodynamik*, Bd. 3 d. Reihe *Vorlesungen über theoretische Physik*. Harry Deutsch, Thun, 4. Aufl., 1988.

- [56] SOTO, F. und P. CLAVERIE: *When is the Wigner function of multi-dimensional system nonnegative?*. Journal of Mathematical Physics, 24:97–100, 1983.
- [57] SOTO-EGUIBAR, F. und P. CLAVERIE: *Time Evolution of the Wigner function*. Journal of Mathematical Physics, 24:1104–1109, 1983.
- [58] SPIEGEL, E. A.: *The Simple Particle and the Perfect Fluid*. In: TABOR, M. und Y. M. TREVE (Hrsg.): *Mathematical Methods in Hydrodynamics and Integrability in Dynamical Systems*, Nr. 88 in *AIP Conference Proceedings*, S. 145–162, New York, 1982. AIP, American Institute of Physics.
- [59] SPINA, A. und R. T. SKODJE: *The phase-space hydrodynamic model for the quantum standard map*. Computer Physics Communications, 63:279–305, 1991.
- [60] STROH, T.: *Wellenpakete, zeitliche Erwartungswerte und Tunnelzeiten und deren Computersimulation*. Diplomarbeit, Universität–Gesamthochschule Siegen, 1992.
- [61] STROH, T.: *Computerdarstellung einfacher, exakt lösbarer Probleme der inversen Spektraltheorie in der Quantenmechanik*. In: HÖHLER, G. und H. M. STAUDENMAIER (Hrsg.): *Beiträge des XI. Computerworkshops in Halle vom 3. bis 5. Oktober 1996*, Nr. 8 in *Computer Theoretikum und Praktikum für Physiker*, S. 18–31. Fachinformationszentrum Karlsruhe, Karlsruhe, 1996.
- [62] STROH, T. und B. N. ZAKHARIEV: *Instructive Comparison of Perturbations of Potentials Shifting Energy Levels and Moving Bound States in the Configurational Space*. Physica Scripta, 55:9–11, 1997.
- [63] TAKABAYASI, T.: *On the Formulation of Quantum Mechanics Associated with Classical Pictures*. Prog. Theor. Phys., 8:143–182, 1952.
- [64] TORRES-VEGA, G. und J. H. FREDERICK: *Quantum mechanics in phase space: New approaches to the correspondence principle*. Journal of Chemical Physics, 93:8862–8874, 1990.
- [65] TORRES-VEGA, G. und J. H. FREDERICK: *A quantum mechanical representation in phase space*. Journal of Chemical Physics, 98:3103–3120, 1993.
- [66] WEYL, H.: *Quantenmechanik und Gruppentheorie*. Zeitschrift für Physik, 46:1–46, 1927.
- [67] WIGNER, E.: *On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium*. Physical Review, 40:749–759, 1932.

Danksagung:

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. H. D. Dahmen für die Möglichkeit dieses Thema zu bearbeiten und für seine ständige Diskussionsbereitschaft.

In gleicher Weise bedanke ich mich bei Herrn Prof. Dr. S. Brandt sowohl für das Interesse am Fortgang der Arbeit wie auch für die Übernahme des Zweitgutachtens.

Den Mitgliedern des Fachbereichs möchte ich für die angenehme Arbeitsatmosphäre danken.

Den zahlreichen Gesprächspartnern innerhalb und außerhalb des Fachbereichs danke ich für die wertvollen Anregungen.