

**Zur Theorie und Anwendung  
nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen  
in der klassischen Mechanik  
und in der Quantenmechanik**

Von der Fakultät Physik der Universität Stuttgart  
zur Erlangung der Würde eines  
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)  
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von  
**Axel Pelster**  
aus Backnang

Hauptberichter:	Prof. Dr. A. Wunderlin
Mitberichter:	Prof. Dr. M. Wagner
Tag der mündlichen Prüfung:	15. Februar 1996

Institut für Theoretische Physik und Synergetik der  
Universität Stuttgart

1996

*Für Brigitte und Jasmin*



# Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	7
Symbolverzeichnis	9
Zusammenfassung	17
<b>I Zur Theorie nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in mehreren Raumdimensionen</b>	<b>19</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>21</b>
1.1 Klassische Mechanik . . . . .	22
1.2 Quantenmechanik . . . . .	25
1.3 Problemstellung . . . . .	26
<b>2 Klassische Mechanik</b>	<b>31</b>
2.1 Newtonsche Mechanik . . . . .	32
2.1.1 Newton-Gleichung und Energieerhaltungssatz . . . . .	32
2.1.2 Transformation der Raumkoordinaten . . . . .	33
2.1.3 Transformation der Zeitkoordinate . . . . .	34
2.2 Lagrangesche Mechanik . . . . .	35
2.2.1 Hamiltonsches Prinzip . . . . .	36

2.2.2	Transformation der Raumkoordinaten . . . . .	37
2.2.3	Transformation der Zeitkoordinate . . . . .	38
2.3	Hamiltonsche Mechanik . . . . .	40
2.3.1	Modifiziertes Hamiltonsches Prinzip . . . . .	40
2.3.2	Transformation der Raumkoordinaten . . . . .	41
2.3.3	Transformation der Zeitkoordinate . . . . .	43
2.4	Zusammenfassung der Ergebnisse . . . . .	44
<b>3</b>	<b>Quantenmechanik</b>	<b>47</b>
3.1	Schrödingersche Quantenmechanik . . . . .	48
3.1.1	Zur Quantisierung klassischer Systeme . . . . .	48
3.1.2	Schrödingersches Anfangswertproblem . . . . .	50
3.1.3	Definition der Ortsdarstellung . . . . .	51
3.1.4	Übergang zur Ortsdarstellung . . . . .	52
3.1.5	Transformation der Raumkoordinaten . . . . .	54
3.1.6	Transformation der Zeitkoordinate . . . . .	55
3.2	Feynmansche Quantenmechanik . . . . .	58
3.2.1	Pfadintegraldarstellung des Propagators . . . . .	59
3.2.2	Berechnung des Kurzzeitpropagators . . . . .	61
3.2.3	Herleitung der Schrödinger-Gleichung . . . . .	63
3.2.4	Äquivalente Kurzzeitpropagatoren . . . . .	65
3.2.5	Transformation der Raumkoordinaten . . . . .	65
3.2.6	Transformation der Zeitkoordinate . . . . .	68
3.3	Heisenbergsche Quantenmechanik . . . . .	72
3.3.1	Heisenbergsches Anfangswertproblem . . . . .	73

Inhaltsverzeichnis	3
3.3.2 Transformation der Raumkoordinaten . . . . .	74
3.3.3 Transformation der Zeitkoordinate . . . . .	76
3.4 Zusammenfassung der Ergebnisse . . . . .	78
<b>II Zur Anwendung nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in einer Raumdimension</b>	<b>81</b>
<b>4 Ein Beispiel</b>	<b>83</b>
4.1 Vorbereitungen . . . . .	84
4.1.1 Einführung der Potentialparameter . . . . .	84
4.1.2 Spezialisierung auf eine Raumdimension . . . . .	85
4.1.3 Klassische Mechanik . . . . .	85
4.1.4 Quantenmechanik . . . . .	87
4.2 Problemstellung . . . . .	88
4.3 Klassische Mechanik . . . . .	89
4.4 Quantenmechanik . . . . .	91
4.4.1 Greensche Funktion des Morse-Potentials . . . . .	91
4.4.2 Spektraldarstellung der Greenschen Funktion . . . . .	94
4.4.3 Diskrete Spektraldaten des Morse-Potentials . . . . .	95
4.4.4 Kontinuierliche Spektraldaten des Morse-Potentials . . . . .	96
<b>5 Abbildungen von Spektraldaten</b>	<b>99</b>
5.1 Darstellungen der Greenschen Funktion . . . . .	100
5.1.1 Randwertproblem . . . . .	100
5.1.2 Abschnittsweise Darstellung . . . . .	101
5.1.3 Spektraldarstellung . . . . .	102

5.2	Beziehung zwischen den Darstellungen . . . . .	103
5.2.1	Rekonstruktion der diskreten Spektraldaten . . . . .	104
5.2.2	Interpolationsfunktionen . . . . .	105
5.2.3	Aufsummation der Spektraldarstellung . . . . .	107
5.2.4	Beispiel . . . . .	110
5.3	Herleitung . . . . .	112
5.3.1	Greensche Funktion des Endsystems . . . . .	112
5.3.2	Greensche Funktion des Ausgangssystems . . . . .	113
5.3.3	Abbildung diskreter Energieeigenwerte . . . . .	114
5.3.4	Abbildung diskreter Energieeigenfunktionen . . . . .	114
5.3.5	Abbildung kontinuierlicher Spektraldaten . . . . .	116
5.4	Beispiel . . . . .	118
5.4.1	Diskrete Spektraldaten des Morse-Potentials . . . . .	118
5.4.2	Kontinuierliche Spektraldaten des Morse-Potentials . . . . .	119
<b>6</b>	<b>Zeitunabhängige Störungstheorie</b>	<b>121</b>
6.1	Problemstellung . . . . .	122
6.2	Potenzreihenentwicklung . . . . .	123
6.3	Fredholmscher Alternativsatz . . . . .	124
6.4	Gestörter harmonischer Oszillator . . . . .	125
6.4.1	Störungstheorie erster Ordnung . . . . .	125
6.4.2	Störungstheorie zweiter Ordnung . . . . .	126
6.5	Rekursionsformel . . . . .	127
6.5.1	Gleichungssystem . . . . .	128
6.5.2	Herleitung der Rekursionsformel . . . . .	129
6.5.3	Lösung der Rekursionsformel . . . . .	130

Inhaltsverzeichnis	5
<b>7 Ausblick</b>	<b>133</b>
<b>A Diracsche Formulierung der klassischen Mechanik</b>	<b>139</b>
A.1 Lagrangesche Mechanik . . . . .	140
A.1.1 Dimensionserweiterung . . . . .	140
A.1.2 Hamiltonsches Prinzip . . . . .	141
A.1.3 Euler-Lagrange-Gleichungen . . . . .	142
A.1.4 Randbedingung . . . . .	143
A.2 Hamiltonsche Mechanik . . . . .	144
A.2.1 Erweiterte Hamilton-Funktion . . . . .	145
A.2.2 Modifiziertes Hamiltonsches Prinzip . . . . .	146
A.2.3 Verallgemeinerte kanonische Transformationen . . . . .	147
A.3 Nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation . . . . .	149
A.3.1 Lagrangesche Mechanik . . . . .	150
A.3.2 Hamiltonsche Mechanik . . . . .	151
<b>B Differentialgeometrie</b>	<b>153</b>
B.1 Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit . . . . .	154
B.1.1 Mannigfaltigkeit . . . . .	154
B.1.2 Affiner Zusammenhang . . . . .	155
B.1.3 Metrik . . . . .	157
B.1.4 Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit . . . . .	158
B.1.5 Riemann-Mannigfaltigkeit . . . . .	159
B.1.6 Cartanscher Krümmungstensor . . . . .	160
B.2 Nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation . . . . .	162
B.2.1 Einbettung . . . . .	162



B.2.2	$D + 1$ -Bein und reziprokes $D + 1$ -Bein . . . . .	163
B.2.3	Transformation der Metriken . . . . .	164
B.2.4	Transformation des affinen Zusammenhanges . . . . .	165
B.3	Differentialgeometrische Interpretation . . . . .	166
<b>Zitatenverzeichnis</b>		<b>179</b>
<b>Danksagung</b>		<b>181</b>
<b>Lebenslauf</b>		<b>183</b>

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Variationen der Trajektorie in der gewöhnlichen Formulierung der Lagrangeschen Mechanik . . . . .	37
2.2	Konsequenzen nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in der klassischen Mechanik . . . . .	45
3.1	Verschiedene Wege eines quantenmechanischen Teilchens . . . . .	60
3.2	Konsequenzen nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in der Quantenmechanik . . . . .	79
4.1	Anwendung nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in der ein-dimensionalen klassischen Mechanik . . . . .	86
4.2	Anwendung nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in der ein-dimensionalen Quantenmechanik . . . . .	87
4.3	Abbildung zwischen dem Morse-Potential und dem Potential des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere . . . . .	90
4.4	Rekonstruktion der Spektraldaten aus der Greenschen Funktion . . . . .	95
5.1	Definition der Integrationskurve . . . . .	108
A.1	Variationen der Trajektorie in der Diracschen Formulierung der Lagrangeschen Mechanik . . . . .	142



# Symbolverzeichnis

$A$	Matrix
$\alpha$	Abklingkonstante
$\vec{b}$	Vektor
$C$	Energieverschiebung
$\delta$	Variation
$D$	Dimension der Riemann-Mannigfaltigkeit
$e^i_\lambda(Q)$	$D$ -Bein
$e_i^\lambda(Q)$	reziprokes $D$ -Bein
$E_{0,n}$	ungestörter Energieeigenwert
$E_{k,n}$	gestörter Energieeigenwert
$\Gamma(z)$	Gamma-Funktion
$g$	Parameter der Zentrifugalbarriere
$h = 2\pi\hbar$	Plancksches Wirkungsquantum
$i$	imaginäre Einheit
$\hat{I}$	Einheitsoperator
$J(Q)$	Determinante des $D$ -Beins
$L_n^{(\nu)}(z)$	verallgemeinertes Laguerre-Polynom
$\hat{L}_n(Q)$	Differentialoperator

$\lambda$	Kleinheitsparameter
$m$	Punktmasse
$M_{\lambda,\mu}(z)$	Whittaker-Funktion
$N$	Anzahl an Intervallen
$\omega$	Frequenz
$\vartheta$	Trajektorienparameter
$\vec{x}$	Vektor
$V_0$	Konstante
$V_0(q)$	ungestörtes Potential
$V_1(q)$	Störpotential
$W_{\lambda,\mu}(z)$	Whittaker-Funktion
$\dagger$	Übergang zum Adjugium
$[ , ]-$	Kommutator
$'$	Ableitung nach dem Trajektorienparameter

Ausgangssystem	Endsystem	
$a, b, c, d, e$	$\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon$	raumzeitliche Indizes
$A_i^{(i)}(q)$	$A_\lambda^{(f)}(Q)$	Vektorpotential
$\mathcal{A}^{(i)}[q^i(t)]$	$\mathcal{A}^{(f)}[Q^\lambda(s)]$	Wirkung
$\delta_j^i$	$\delta_\mu^\lambda$	Kronecker-Symbol
$\delta(t - t_0)$	$\delta(s)$	Delta-Funktion
$\Delta^{(i)}$	$\Delta^{(f)}$	Laplace-Beltrami-Operator
$\partial_i$	$\partial_\lambda$	partielle Ableitung
$E^{(i)}$	$E^{(f)}$	Energie
$E_n^{(i)}$	$E_n^{(f)}$	diskreter Energieeigenwert
$\epsilon$	$\eta$	Intervallbreite
$g^{(i)}(q)$	$g^{(f)}(Q)$	Determinante der kovarianten Metrik
$g_{ij}^{(i)}(q)$	$g_{\lambda\mu}^{(f)}(Q)$	kovariante Metrik
$g^{(i)ij}(q)$	$g^{(f)\lambda\mu}(Q)$	kontravariante Metrik
$\gamma_{ijk}^{(i)}(q)$	$\gamma_{\lambda\mu\nu}^{(f)}(Q)$	Christoffel-Symbol erster Art
$\gamma_{ij}^{(i)k}(q)$	$\gamma_{\lambda\mu}^{(f)\nu}(Q)$	Christoffel-Symbol zweiter Art
$\Gamma_{ij}^{(i)k}(q)$	$\Gamma_{\lambda\mu}^{(f)\nu}(Q)$	affiner Zusammenhang
$G^{(i)}(q, t; q_0, t_0)$	$G^{(f)}(Q, s; Q_0, 0)$	Propagator
$G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0)$	$G_c^{(f)}(Q, s; Q_0, 0)$	kausaler Propagator
$G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)})$	$G_c^{(f)}(Q, Q_0; E^{(f)})$	Greensche Funktion
$H^{(i)}(q^i; p_i)$	$H^{(f)}(Q^\lambda; P_\lambda)$	Hamilton-Funktion
$\hat{H}^{(i)}$	$\hat{H}^{(f)}$	Hamilton-Operator
$i, j, k, l, m$	$\lambda, \mu, \nu, \kappa, \sigma$	räumliche Indizes
$K_{ijk}^{(i)}(q)$	$K_{\lambda\mu\nu}^{(f)}(Q)$	Kontortionstensor
$\lambda^{(i)}$	$\lambda^{(f)}$	Parametersatz

Ausgangssystem	Endsystem	
$L^{(i)}(q^i; \dot{q}^i)$	$L^{(f)}(Q^\lambda; \overset{\circ}{Q}^\lambda)$	Lagrange-Funktion
$O^{(i)} = O^{(i)}(q^i; p_i)$	$O^{(f)} = O^{(f)}(Q^\lambda; P_\lambda)$	klassische Observable
$\hat{O}^{(i)} = O^{(i)}(\hat{q}^i; \hat{p}_i)$	$\hat{O}^{(f)} = O^{(f)}(\hat{Q}^\lambda; \hat{P}_\lambda)$	quantenmechanischer Operator
$p_i$	$P_\lambda$	Impulskoordinate
$\hat{p}_i$	$\hat{P}_\lambda$	Impulsoperator
$ p\rangle$	$ P\rangle$	Eigenvektor zum Impulsoperator
$ \psi^{(i)}(t)\rangle$	$ \psi^{(f)}(s)\rangle$	Zustandsvektor
$\psi^{(i)}(q)$	$\psi^{(f)}(Q)$	Wellenfunktion
$\psi_n^{(i)}(q)$	$\psi_n^{(f)}(Q)$	diskrete Energieeigenfunktion
$\psi_E^{(i)}(q)$	$\psi_E^{(f)}(Q)$	kontinuierliche Energieeigenfunktion
$q^i$	$Q^\lambda$	Raumkoordinate
$\dot{q}^i$	$\overset{\circ}{Q}^\lambda$	Geschwindigkeitskoordinate
$\bar{q}^a$	$\bar{Q}^\alpha$	Raum-Zeit-Koordinate
$\hat{q}^i$	$\hat{Q}^\lambda$	Ortsoperator
$ q\rangle$	$ Q\rangle$	Eigenvektor zum Ortsoperator
$r_{ijk}^{(i)l}(q)$	$r_{\lambda\mu\nu}^{(f)\kappa}(Q)$	Riemannscher Krümmungstensor
$r_{ij}^{(i)}(q)$	$r_{\lambda\mu}^{(f)}(Q)$	Ricci-Tensor
$r^{(i)}(q)$	$r^{(f)}(Q)$	Riemannscher Krümmungsskalar
$R_{ijk}^{(i)l}(q)$	$R_{\lambda\mu\nu}^{(f)\kappa}(Q)$	Cartanscher Krümmungstensor
$R_{ij}^{(i)}(q)$	$R_{\lambda\mu}^{(f)}(Q)$	Ricci-Tensor
$R^{(i)}(q)$	$R^{(f)}(Q)$	Cartanscher Krümmungsskalar
$S_{ij}^{(i)k}(q)$	$S_{\lambda\mu}^{(f)\nu}(Q)$	Cartanscher Torsionstensor
$S_i^{(i)}(q)$	$S_\lambda^{(f)}(Q)$	Cartanscher Torsionsvektor
$S^{(i)}(q)$	$S^{(f)}(Q)$	Cartanscher Torsionsskalar

Ausgangssystem	Endsystem	
$t$	$s$	Zeitkoordinate
$\Theta(t - t_0)$	$\Theta(s)$	Heaviside-Funktion
$\hat{U}^{(i)}(t, t_0)$	$\hat{U}^{(f)}(s, 0)$	Zeitentwicklungsoperator
$\hat{U}_c^{(i)}(t, t_0)$	$\hat{U}_c^{(f)}(s, 0)$	kausaler Zeitentwicklungsoperator
$\hat{U}_c^{(i)}(E^{(i)})$	$\hat{U}_c^{(f)}(E^{(f)})$	Resolventenoperator
$V^{(i)}(q)$	$V^{(f)}(Q)$	skalares Potential
$\{ , \}_{q,p}$	$\{ , \}_{Q,P}$	Poisson-Klammer
$\cdot$	$\circ$	Ableitung nach der Zeitkoordinate





*Wenn die Naturgesetze vorgegeben sind,  
ist die Frage nach ihren Symmetrien ein  
wichtiger Gegenstand der Forschung.*

**H. Genz**



*Die absolute, wahre und mathematische  
Zeit verfließt an sich und vermöge ihrer  
Natur gleichförmig, und ohne Beziehung  
auf irgendeinen äußeren Gegenstand.*

I. Newton (1643 – 1727)

## Zusammenfassung

In der nichtrelativistischen klassischen Mechanik und in der nichtrelativistischen Quantenmechanik sieht man die Zeit im Sinne Newtons als gleichförmig fließende, absolute physikalische Größe an, die die Trajektorien im Konfigurationsraum und die Zustandsvektoren im Hilbert-Raum parametrisiert. Diese passive Rolle der Zeit wird dadurch unterstrichen, daß bei kanonischen oder bei unitären Transformationen keine Veränderungen der Zeit betrachtet werden. Das Ziel der vorliegenden Arbeit besteht darin, die Eigenschaften solcher nichtkanonischen und nichtunitären Transformationen zu untersuchen, die eine lokale Reparametrisierung der Trajektorien im Konfigurationsraum und der Zustandsvektoren im Hilbert-Raum zulassen. Die physikalische Bedeutung dieser sogenannten nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen besteht darin, daß sie die nichtrelativistische klassische Mechanik und die nichtrelativistische Quantenmechanik forminvariant lassen und dadurch Abbildungen zwischen verschiedenen klassischen oder quantenmechanischen Systemen ermöglichen.

Der theoretische Teil der Arbeit führt mit Kapitel 1 in die grundlegenden Konzepte nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen ein. Anschließend wird in Kapitel 2 und in Kapitel 3 systematisch untersucht, wie nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen in der klassischen Mechanik und in der Quantenmechanik durchgeführt werden können. Einem wissenschaftstheoretischen Gedanken Feynmans [34, 36] folgend wird mit Hilfe unterschiedlicher mathematischer Methoden bewiesen, daß alle Standardformulierungen dieser beiden physikalischen Theorien unter nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen invariant sind. Dabei zeigt sich sowohl in der Newtonschen, Lagrangeschen und Hamiltonschen Mechanik als auch in der Schrödingerschen, Feynmanschen und Heisenbergschen Quantenmechanik, daß man immer dieselben klassischen oder quantenmechanischen Transformationsvorschriften für die jeweiligen physikalischen Größen erhält. Im Falle einer nichtrelativisti-

schen Punktmasse, die sich auf einer Riemann-Mannigfaltigkeit unter dem Einfluß äußerer Potentiale bewegt, stimmen sogar die quantenmechanischen Transformationen der Metrik und des Vektorpotentials mit den klassischen überein. Demgegenüber enthält die quantenmechanische Transformation des skalaren Potentials neben dem klassischen Beitrag noch einen zusätzlichen Term, der vom Quadrat des Planckschen Wirkungsquantums abhängt. Anhang B zeigt unter Verwendung der Riemann-Cartan-Differentialgeometrie, daß dieser zusätzliche Term mit derjenigen Krümmung und Torsion der Raum-Zeit-Struktur übereinstimmt, die durch die nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation hervorgerufen wird. Außerdem ermöglicht Anhang A durch eine gleichberechtigte Behandlung von Raum- und Zeitkoordinaten im Rahmen der Diracschen Formulierung der klassischen Mechanik, nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen als verallgemeinerte kanonische Transformationen zu identifizieren.

Der anwendungsorientierte Teil der Arbeit beschäftigt sich mit den Eigenschaften der Abbildungen, die nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen in einer Raumdimension zwischen verschiedenen klassischen oder quantenmechanischen Systemen ermöglichen. Zunächst wird in Kapitel 4 anhand eines nichttrivialen Beispiels demonstriert, daß diese Abbildungen zu neuen Methoden führen, mit denen sich Trajektorien und kausale Propagatoren berechnen lassen. Dann wird in Kapitel 5 untersucht, wie sich nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen auf die Abbildung quantenmechanischer Spektraldaten auswirken. Eine Verallgemeinerung der Sommerfeld-Watson-Transformation der Streutheorie zeigt durch eine analytische Fortsetzung bezüglich der Quantenzahl, daß sowohl eine eindeutige Abbildung zwischen diskreten Spektraldaten als auch eine Konvertierung von diskreten in kontinuierlichen Spektraldaten vorliegen kann. In Kapitel 6 werden die nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen um die Identität entwickelt. Dies eröffnet einen neuen Zugang zur zeitunabhängigen Störungstheorie, da sich dadurch das ungestörte System auf das gestörte System abbilden läßt. Im Unterschied zur konventionellen Störungstheorie stellt sich heraus, daß die gestörten Energieeigenwerte mit Hilfe von Rekursionsformeln ohne Kenntnis der ungestörten Energieeigenfunktionen berechnet werden können.

Abschließend diskutiert Kapitel 7, welche Fragestellungen zur Theorie und Anwendung nichtintegraler Raum-Zeit-Transformationen auf der Grundlage der vorliegenden Arbeit in Zukunft untersucht werden könnten.

# Teil I

## **Zur Theorie nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in mehreren Raumdimensionen**



*Symmetrie, ob man ihre Bedeutung weit  
oder eng faßt, ist eine Idee, vermöge derer  
der Mensch durch die Jahrtausende seiner  
Geschichte versucht hat, Ordnung, Schönheit und  
Vollkommenheit zu begreifen und zu schaffen.*  
H. Weyl (1885 – 1955)

# Kapitel 1

## Einleitung

Die Einleitung vermittelt auf historischem Wege eine Einführung in die grundlegenden Konzepte nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen. Dabei werden die Unterschiede und die Gemeinsamkeiten der Fragestellungen herausgearbeitet, die zur Entwicklung nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in der klassischen Mechanik und in der Quantenmechanik beigetragen haben.

Abschnitt 1.1 schildert, daß nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen in der klassischen Mechanik eingeführt wurden, um Singularitäten im  $N$ -Körperproblem zu regularisieren, die vom Zusammenstoß mehrerer Körper herrühren. Dieses Verfahren wird exemplarisch anhand der Kustaanheimo-Stiefel-Transformation [88] diskutiert, die das zum 2-Körperproblem analoge dreidimensionale Kepler-Problem auf den vierdimensionalen harmonischen Oszillator abbildet und dadurch die Singularität im Ursprung entfernt. In Abschnitt 1.2 wird dargestellt, daß nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen in der Quantenmechanik ursprünglich verwendet wurden, um Pfadintegrale auch für singuläre Potentiale explizit auswerten zu können. So ermöglicht die Duru-Kleinert-Transformation [25, 26] durch Anwendung der Kustaanheimo-Stiefel-Transformation [88], das Pfadintegral des singulären dreidimensionalen Wasserstoffatoms auf das Pfadintegral des vierdimensionalen harmonischen Oszillators abzubilden und damit zu regularisieren. Abschnitt 1.3 faßt die Gemeinsamkeit beider Beispiele zusammen, daß nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen Abbildungen zwischen verschiedenen klassischen oder quantenmechanischen Systemen ermöglichen können. Außerdem wird das Ziel der vorliegenden Arbeit vorgestellt, diese interessante Eigenschaft nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen anhand einer eng umrissenen Problemstellung näher zu untersuchen.



## 1.1 Klassische Mechanik

Das  $N$ -Körperproblem der klassischen Mechanik im engeren Sinne besteht darin, für beliebig vorgegebene Anfangswerte die Trajektorien von  $N$  Punktmassen zu beschreiben, die sich nach dem Newtonschen Gravitationsgesetz gegenseitig anziehen. Trotz der Bemühungen hervorragender Mathematiker und Physiker ist es bis heute nicht gelungen, dieses Problem für  $N > 2$  zu lösen. Die größte Schwierigkeit rührt dabei daher, etwaige Zusammenstöße von Körpern, die aufgrund des singulären Newtonschen Gravitationspotentials möglich sind, adäquat zu behandeln [118, S. 21].

Einige Fortschritte wurden gegen Ende des vergangenen Jahrhunderts erzielt, als der damalige König von Schweden und Norwegen auf Anregung des Mathematikers Mittag-Leffler einen Preis für die Lösung der Aufgabe stiftete, eine für alle Zeiten gültige Reihenentwicklung der Raumkoordinaten der  $N$  Punktmassen zu finden. Der Preis wurde 1889 Poincaré zuerkannt, obwohl auch er die gestellte Aufgabe nicht lösen konnte. Seine Preisschrift [105] enthält jedoch eine Fülle von originellen Ideen, die für die weitere Entwicklung der Mathematik und der klassischen Mechanik von Bedeutung waren. So untersuchte Poincaré beispielsweise, wie sich eine Reparametrisierung von Trajektorien durch eine Transformation der Zeitkoordinate auf Integralinvarianten auswirkt [105, S. 64]. Dabei setzte er nicht voraus, daß die Beziehung zwischen der ursprünglichen Zeitkoordinate  $t$  und der neuen Zeitkoordinate  $s$  explizit bekannt ist. Vielmehr nahm er an, daß deren infinitesimalen Veränderungen  $dt$  und  $ds$  zueinander proportional sind und daß eine positive Proportionalitätskonstante  $f(q)$  stetig differenzierbar von den Raumkoordinaten  $q$  aller Punktmassen abhängen kann:

$$\frac{dt}{ds} = f(q). \quad (1.1)$$

Damit definierte Poincaré eine lokale, das heißt eine von Raumpunkt zu Raumpunkt variierende Zeittransformation.

1913 gelang Sundman mit Hilfe des Poincaréschen Ansatzes (1.1), die Preisfrage zum  $N$ -Körperproblem im Falle  $N = 3$  zu lösen [126]. Dazu wählte er die Funktion  $f(q)$  so, daß die ursprüngliche Zeitkoordinate  $t$  und die Raumkoordinaten  $q$  der drei Punktmassen als Funktion der neuen Zeitkoordinate  $s$  auch noch beim Zusammenstoß zweier oder aller drei Körper regulär bleiben. Dadurch gewann er

Reihenentwicklungen von  $t$  und  $q$  nach Potenzen von  $s$ , die den gesamten Bewegungsvorgang darstellen [118, Kap. 1]. Leider läßt sich diese Sundmansche Regularisierungsmethode nicht zur Lösung der Preisfrage für  $N > 3$  ausdehnen, da dann etwaige Zusammenstöße von drei Körpern zu wesentlichen Singularitäten führen [118, S. 69].

1965 zeigten Kustaanheimo und Stiefel, daß eine Poincarésche Zeittransformation zusammen mit einer geeigneten Raumtransformation auch zur Regularisierung singulärer Potentiale verwendet werden kann [88]. Hierzu untersuchten sie das zum 2-Körperproblem analoge Kepler-Problem, dessen Singularität im Ursprung dem Zusammenstoß zweier Körper entspricht. Zunächst ergänzten sie die drei Raumkoordinaten  $q^1, q^2, q^3$  durch eine Hilfskoordinate  $q^4$ , die der Nebenbedingung

$$q^4 = 0 \quad (1.2)$$

unterworfen wird. Dann führten sie eine lokale Transformation von den ursprünglichen vier Raumkoordinaten  $q^i$  mit  $i = 1, 2, 3, 4$  zu vier neuen Raumkoordinaten  $Q^\lambda$  mit  $\lambda = 1, 2, 3, 4$  durch, die quaternionische Quadratwurzeln darstellen [16, 87, 88]:

$$dq^i = e^i_\lambda(Q) dQ^\lambda. \quad (1.3)$$

Das dabei auftretende 4-Bein  $e^i_\lambda(Q)$  ist durch

$$\begin{pmatrix} e^1_1(Q) & e^1_2(Q) & e^1_3(Q) & e^1_4(Q) \\ e^2_1(Q) & e^2_2(Q) & e^2_3(Q) & e^2_4(Q) \\ e^3_1(Q) & e^3_2(Q) & e^3_3(Q) & e^3_4(Q) \\ e^4_1(Q) & e^4_2(Q) & e^4_3(Q) & e^4_4(Q) \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} Q^1 & -Q^2 & -Q^3 & Q^4 \\ Q^2 & Q^1 & -Q^4 & -Q^3 \\ Q^3 & Q^4 & Q^1 & Q^2 \\ Q^4 & -Q^3 & Q^2 & -Q^1 \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

definiert und erfüllt für  $i = 1, 2, 3$  die Schwarzsche Integrabilitätsbedingung [8, S. 568], [66, S. 385]

$$\partial_\mu e^i_\lambda(Q) - \partial_\lambda e^i_\mu(Q) = 0. \quad (1.5)$$

Demnach ist die Raumtransformation (1.3), (1.4) für  $i = 1, 2, 3$  integrabel, so daß die Beziehung zwischen den drei ursprünglichen Raumkoordinaten  $q^1, q^2, q^3$  und den vier neuen Raumkoordinaten  $Q^1, Q^2, Q^3, Q^4$  nicht nur lokal, sondern sogar global angegeben werden kann:

$$\begin{aligned} q^1(Q) &= (Q^1)^2 - (Q^2)^2 - (Q^3)^2 + (Q^4)^2, \\ q^2(Q) &= 2 (Q^1 Q^2 - Q^3 Q^4), \\ q^3(Q) &= 2 (Q^1 Q^3 + Q^2 Q^4). \end{aligned} \quad (1.6)$$

Demgegenüber genügt das 4-Bein  $e^i_\lambda(Q)$  für  $i = 4$  nicht der Schwarzschen Integrierbarkeitsbedingung, da beispielsweise

$$\partial_4 e^4_1(Q) - \partial_1 e^4_4(Q) = 4, \quad \partial_3 e^4_2(Q) - \partial_2 e^4_3(Q) = -4 \quad (1.7)$$

gilt. Dies bedeutet, daß die Raumtransformation (1.3), (1.4) für  $i = 4$  nichtintegrabel ist und als lokale Beziehung zwischen der Hilfskoordinate  $q^4$  sowie den vier neuen Raumkoordinaten  $Q^1, Q^2, Q^3, Q^4$  kein globales Gegenstück besitzt. Nach (1.2)–(1.4) hat das zur Folge, daß die neuen Raumkoordinaten einer nichtholonomen Nebenbedingung [45, S. 44], [92, S. 143] unterliegen:

$$Q^4 dQ^1 - Q^3 dQ^2 + Q^2 dQ^3 - Q^1 dQ^4 = 0. \quad (1.8)$$

Damit arbeiteten Kustaanheimo und Stiefel eine Raumtransformation (1.3), (1.4) in das Kepler-Problem ein, die insgesamt als nichtintegrabel anzusehen ist. Anschließend führten sie eine Poincarésche Zeittransformation

$$\frac{dt}{ds} = f(Q) \quad (1.9)$$

durch, wobei sie mit Hilfe von

$$f(Q) = 4 \left\{ (Q^1)^2 + (Q^2)^2 + (Q^3)^2 + (Q^4)^2 \right\} \quad (1.10)$$

die Zeitkoordinate  $t$  durch eine neue Zeitkoordinate  $s$  ersetzen, die der exzentrischen Anomalie des Kepler-Problems [124, S. 38] entspricht. Faßt man die Zeitkoordinaten  $t, s$  und die Raumkoordinaten  $q^i, Q^\lambda$  zu Raum-Zeit-Koordinaten

$$\bar{q}^a = \begin{cases} t & ; a = 0, \\ q^i & ; a = i = 1, 2, 3, 4, \end{cases} \quad (1.11)$$

$$\bar{Q}^\alpha = \begin{cases} s & ; \alpha = 0, \\ Q^\lambda & ; \alpha = \lambda = 1, 2, 3, 4 \end{cases} \quad (1.12)$$

zusammen, so gehen (1.3), (1.4) und (1.9), (1.10) in die lokale Raum-Zeit-Transformation

$$d\bar{q}^a = \bar{e}^a_\alpha(\bar{Q}) d\bar{Q}^\alpha \quad (1.13)$$

über. Dabei tritt mit

$$\begin{pmatrix} \bar{e}^0_0(\bar{Q}) & \bar{e}^0_\lambda(\bar{Q}) \\ \bar{e}^i_0(\bar{Q}) & \bar{e}^i_\lambda(\bar{Q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(Q) & 0 \\ 0 & e^i_\lambda(Q) \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

ein 5-Bein  $\bar{e}^a_\alpha(\bar{Q})$  auf, das nach (1.4), (1.10) weder für den zeitlichen Index  $a = 0$

$$\bar{\partial}_\lambda \bar{e}^0_0(\bar{Q}) - \bar{\partial}_0 \bar{e}^0_\lambda(\bar{Q}) = 8 Q^\lambda \quad (1.15)$$

noch für den räumlichen Index  $a = 4$

$$\bar{\partial}_4 \bar{e}_1^4(\bar{Q}) - \bar{\partial}_1 \bar{e}_4^4(\bar{Q}) = 4, \quad \bar{\partial}_3 \bar{e}_2^4(\bar{Q}) - \bar{\partial}_2 \bar{e}_3^4(\bar{Q}) = -4 \quad (1.16)$$

der Schwarzschen Integrabilitätsbedingung genügt. Deshalb ist nicht nur die Raumtransformation (1.3), (1.4), sondern auch die Poincarésche Zeittransformation (1.9), (1.10) als nichtintegabel zu bezeichnen. Beide sind nur lokal definiert, globale Formulierungen sind nicht angebar.

Kustaanheimo und Stiefel konnten zeigen, daß die nichtintegable Raum-Zeit-Transformation (1.3), (1.4), (1.9), (1.10) das dreidimensionale Kepler-Problem auf den vierdimensionalen harmonischen Oszillator abbildet [88]. Dabei wurden sowohl die Potentiale als auch die Trajektorien beider Systeme ineinander überführt. Die Kustaanheimo-Stiefel-Transformation diente ursprünglich zur Regularisierung des dreidimensionalen Kepler-Problems, da sie dessen Singularität im Ursprung entfernt. Außerdem ermöglichte sie die Entwicklung eines numerisch stabilen Algorithmus, mit dem Satellitenprobleme der Himmelsmechanik störungstheoretisch behandelt werden können [77, 88, 124].

## 1.2 Quantenmechanik

Im Laufe der Entwicklung der Quantenmechanik gelang es, den atomaren Aufbau der Materie mit Hilfe grundsätzlich verschiedener mathematischer Konzepte zu beschreiben. Die Heisenbergsche Matrizenmechanik und die Schrödingersche Wellenmechanik stellen lokale Formulierungen der Quantenmechanik dar. Ausgehend von der Hamilton-Funktion der klassischen Mechanik wird heuristisch ein Hamilton-Operator konstruiert, der die Dynamik von Operatoren und von Zustandsvektoren bestimmt [112, 113, 114]. Demgegenüber ermöglicht die Feynmansche Pfadintegralformulierung einen globalen Zugang zur Quantenmechanik, bei dem die klassische Wirkung entlang aller möglichen Wege in der Raum-Zeit gemittelt wird [20, 21, 32].

Obwohl alle drei Formulierungen der Quantenmechanik mathematisch äquivalent sind, konnte das Feynmansche Pfadintegral über viele Jahre hinweg nur für einfache Systeme, wie zum Beispiel für das freie Teilchen oder für den harmonischen Oszillator, analytisch berechnet werden [33, 116]. Das lag zum einen an der prinzipiellen mathematischen Schwierigkeit, im zeitgitterten Pfadintegral einen Grenzwert

unendlich vieler Integrale explizit auszuwerten. Zum anderen bestand das Problem, daß das ursprünglich von Feynman angegebene zeitgitterte Pfadintegral, das auf der Trotter-Produktformel beruht, nicht auf die physikalisch interessanten singulären Potentiale anwendbar ist [82, Kap. 12], [108, S. 37]. Beispielsweise gelang es in der Feynmanschen Quantenmechanik zunächst nicht, das dreidimensionale Wasserstoffatom zu behandeln, das gerade den Erfolg der Heisenbergschen Matrizenmechanik und der Schrödingerschen Wellenmechanik begründet hatte [82, S. IX].

Diese Schwierigkeiten motivierten Duru und Kleinert 1979, eine neue Methode zu entwickeln, mit der sich Pfadintegrale explizit auswerten lassen [25, 26]. Sie kombinierten Poincarésche Zeittransformationen mit entsprechenden Raumtransformationen zu lokalen Reparametrisierungen von Pfaden, die bislang unbekannte Pfadintegrale auf bereits bekannte Pfadintegrale zurückführten. Durch Wahl geeigneter nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen war es insbesondere möglich, Pfadintegrale so zu transformieren, daß singuläre Potentiale regularisiert wurden.

Um die Anwendbarkeit ihrer Methode zu demonstrieren, zeigten Duru und Kleinert, daß die Kustaanheimo-Stiefel-Transformation [88] das bis dahin ungelöste Pfadintegral des singulären dreidimensionalen Wasserstoffatoms auf das Pfadintegral des vierdimensionalen harmonischen Oszillators abbilden kann [25, 26]. Auf diese Weise reproduzierten sie eine Integraldarstellung für die Greensche Funktion des Wasserstoffatoms, die zuvor schon von Hostler [68] im Rahmen der Schrödingerschen Quantenmechanik gefunden worden war. Außerdem präzisierten sie das gruppentheoretische Ergebnis [2, S. 62], [78], daß zwischen dem dreidimensionalen Wasserstoffatom und dem vierdimensionalen harmonischen Oszillator aufgrund der gemeinsamen dynamischen Symmetriegruppe  $O(4, 2)$  [2, 3, 49] eine Beziehung besteht. Die Duru-Kleinert-Transformation dient heute als Vorbild, die Pfadintegrale zahlreicher Standardprobleme mit Hilfe nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen zu berechnen [54, 69, 76, 82].

### 1.3 Problemstellung

Aus der historischen Übersicht in den beiden vorangegangenen Abschnitten geht hervor, daß nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen in der klassischen Mechanik und in der Quantenmechanik ursprünglich entwickelt worden sind, um singuläre

Potentiale zu regularisieren. So dienen die Kustaanheimo-Stiefel-Transformation und die Duru-Kleinert-Transformation dazu, das dreidimensionale Kepler-Problem und das dreidimensionale Wasserstoffatom auf den vierdimensionalen harmonischen Oszillator abzubilden und damit zu regularisieren. Sieht man einmal von der Besonderheit ab, daß dabei die räumliche Dimension verändert wird, dann demonstrieren beide Beispiele, daß nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen interessante Abbildungen zwischen verschiedenen klassischen oder quantenmechanischen Systemen ermöglichen. Deshalb hat die vorliegende Arbeit das Ziel, anhand einer eng umrissenen Problemstellung der Frage nachzugehen, inwieweit nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen generell dazu in der Lage sind, zwei klassische oder zwei quantenmechanische Systeme miteinander zu verbinden, die gewöhnlich unabhängig voneinander behandelt werden.

In Kapitel 2 und in Kapitel 3 werden die unterschiedlichen Formulierungen der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik dahingehend überprüft, ob sie unter einer speziellen Klasse nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen invariant sind. Hierzu wird eine nichtrelativistische Punktmasse  $m$  betrachtet, die sich auf einer  $D$ -dimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit unter dem Einfluß äußerer Potentiale bewegt. Die klassischen und die quantenmechanischen Bewegungsgleichungen dieser Punktmasse sind aufgrund des Kovarianzprinzips [42, S. 113], [70, S. 158], [129, S. 91] zumindest unter integralen Raumtransformationen forminvariant. Dabei wird ein lokaler Wechsel von den  $D$  ursprünglichen Raumkoordinaten  $q^i$  mit  $i = 1, \dots, D$  zu  $D$  neuen Raumkoordinaten  $Q^\lambda$  mit  $\lambda = 1, \dots, D$  vollzogen

$$dq^i = e^i_\lambda(Q) dQ^\lambda, \quad (1.17)$$

bei dem das  $D$ -Bein  $e^i_\lambda(Q)$  der Schwarzschen Integrabilitätsbedingung [8, S. 568], [66, S. 385] genügt:

$$\partial_\mu e^i_\lambda(Q) - \partial_\lambda e^i_\mu(Q) = 0. \quad (1.18)$$

Deshalb läßt sich die lokale Raumtransformation (1.17) auch global angeben:

$$q^i = q^i(Q). \quad (1.19)$$

Es zeigt sich aber, daß die Form der klassischen und der quantenmechanischen Bewegungsgleichungen auch durch Poincarésche Zeittransformationen nicht verändert wird. Dabei erfolgt der lokale Wechsel von der ursprünglichen Zeitkoordinate  $t$  zur neuen Zeitkoordinate  $s$  so, daß deren infinitesimalen Veränderungen  $dt$  und  $ds$

zueinander proportional sind

$$\frac{dt}{ds} = f(Q) \quad (1.20)$$

und daß die positive Proportionalitätskonstante  $f(Q)$  stetig differenzierbar von den neuen Raumkoordinaten  $Q^\lambda$  mit  $\lambda = 1, \dots, D$  abhängt. Faßt man die lokalen Raum-Zeit-Transformationen (1.17) und (1.20) analog zu (1.11)–(1.14) zusammen, so tritt ein  $D + 1$ -Bein  $\bar{e}_\alpha^a(\bar{Q})$  auf, das die Schwarzsche Integrabilitätsbedingung wegen (1.18) nur für den zeitlichen Index  $a = 0$  nicht erfüllt:

$$\bar{\partial}_\lambda \bar{e}_0^0(\bar{Q}) - \bar{\partial}_0 \bar{e}_\lambda^0(\bar{Q}) = \partial_\lambda f(Q). \quad (1.21)$$

Deshalb ist die Poincarésche Zeittransformation (1.20) nichtintegrabel und kann als lokale Beziehung zwischen den beiden Zeitkoordinaten  $t, s$  nicht global angegeben werden.

Führt man die integrable Raumtransformation (1.19) und die nichtintegrable Zeittransformation (1.20) hintereinander aus, so erhält man insgesamt eine spezielle nichtintegrable Raum-Zeit-Transformation. Der Nachweis in Kapitel 2 und in Kapitel 3, daß diese nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen die klassischen und die quantenmechanischen Bewegungsgleichungen einer nichtrelativistischen Punktmasse forminvariant lassen, ist in zweierlei Hinsicht von grundsätzlicher Bedeutung. Zum einen wird dadurch der übliche Kovarianzbegriff [42, S. 113], [70, S. 158], [129, S. 91] erweitert, der nur integrable Raum-Zeit-Transformationen berücksichtigt. Zum anderen werden dadurch die oben angesprochenen Abbildungen zwischen verschiedenen klassischen oder quantenmechanischen Systemen erzeugt, deren Eigenschaften in den Kapiteln 4 bis 6 im Falle einer einzelnen Raumdimension näher diskutiert werden.

Daß solche Abbildungen aber auch in mehreren Raumdimensionen möglich sind, zeigt das zweidimensionale Beispiel von Levi-Civita [90]. Dort wird zunächst eine integrable Raumtransformation (1.17) durchgeführt, bei der die beiden ursprünglichen Raumkoordinaten  $q^1, q^2$  in zwei neue Raumkoordinaten  $Q^1, Q^2$  übergehen, die komplexe Quadratwurzeln darstellen. Da das dabei auftretende 2-Bein

$$\begin{pmatrix} e_1^1(Q) & e_2^1(Q) \\ e_1^2(Q) & e_2^2(Q) \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} Q^1 & -Q^2 \\ Q^2 & Q^1 \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

der Schwarzschen Integrabilitätsbedingung (1.18) genügt, läßt sich die lokale Raum-

transformation gemäß (1.19) auch global formulieren:

$$q^1(Q) = (Q^1)^2 - (Q^2)^2, \quad (1.23)$$

$$q^2(Q) = 2 Q^1 Q^2. \quad (1.24)$$

Anschließend wird diese integrable Raumtransformation durch eine nichtintegrale Zeittransformation (1.20) mit

$$f(Q) = 4 \left\{ (Q^1)^2 + (Q^2)^2 \right\} \quad (1.25)$$

ergänzt. Die Levi-Civita-Transformation (1.20), (1.23)–(1.25) dient dazu, das zweidimensionale Kepler-Problem und das zweidimensionale Wasserstoffatom auf den zweidimensionalen harmonischen Oszillator abzubilden und damit zu regularisieren [16, 26, 90].





*Die Zeit muß so definiert werden,  
daß die Gleichungen der Mechanik  
so einfach wie möglich werden.*  
H. Poincaré (1854 – 1912)

## Kapitel 2

# Klassische Mechanik

In diesem Kapitel wird gezeigt, daß die verschiedenen Formulierungen der klassischen Mechanik unter nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen forminvariant sind. Dabei stellt sich heraus, daß die unterschiedlichen mathematischen Methoden auf den einzelnen Beschreibungsebenen immer zu denselben Transformationsvorschriften für die jeweiligen physikalischen Größen führen.

Der Aufbau des Kapitels gliedert sich wie folgt. Es wird das konservative und abgeschlossene System einer nichtrelativistischen Punktmasse betrachtet, die sich auf einer Riemann-Mannigfaltigkeit unter dem Einfluß äußerer Felder bewegt. In der Newtonschen Mechanik (Abschnitt 2.1), in der Lagrangeschen Mechanik (Abschnitt 2.2) und in der Hamiltonschen Mechanik (Abschnitt 2.3) wird gezeigt, daß die Bewegungsgleichung dieser Punktmasse sowohl unter den integrablen Raumtransformationen (1.19) als auch unter den nichtintegrablen Zeittransformationen (1.20) forminvariant ist. Dabei beruht der Nachweis der Forminvarianz unter den nichtintegrablen Zeittransformationen darauf, daß die Energie eines konservativen und abgeschlossenen Systems durch eine geeignete Umeichung der Energieskala zum Verschwinden gebracht werden kann. Die resultierenden Ergebnisse für das Transformationsverhalten der Metrik und der äußeren Felder werden in Abschnitt 2.4 zusammengefaßt, um spätere Anwendungen zu erleichtern. Hierbei besteht die Bedeutung der nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen darin, daß sie eine neue Methode zur Berechnung klassischer Trajektorien zur Verfügung stellen. Anhang A ermöglicht schließlich durch eine gleichberechtigte Behandlung von Raum- und Zeitkoordinaten im Rahmen der Diracschen Formulierung der klassischen Mechanik, die nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen (1.19) und (1.20) als verallgemeinerte kanonische Transformationen zu identifizieren.

## 2.1 Newtonsche Mechanik

Versucht man auf direktem Wege, die Invarianz der Newtonschen Mechanik unter nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen nachzuweisen, so stößt man auf Schwierigkeiten. Transformiert man nämlich die Newton-Gleichung, so entstehen zusätzliche Terme, die die übliche Standardformulierung zu zerstören scheinen. Mit Hilfe eines Kunstgriffes, der von Poincaré [105], [118, S. 35] im Rahmen der Himmelsmechanik eingeführt wurde, gelingt es aber schließlich, diese störenden Terme zu entfernen. Hierzu muß man nicht nur die Newton-Gleichung, sondern unabhängig davon auch deren erstes Integral, den Energieerhaltungssatz, einer nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformation unterziehen.

### 2.1.1 Newton-Gleichung und Energieerhaltungssatz

Nach dem zweiten Newtonschen Gesetz wird die zeitliche Entwicklung eines Systems der klassischen Mechanik durch einen Satz gewöhnlicher Differentialgleichungen zweiter Ordnung für die Trajektorie im zugrunde liegenden Konfigurationsraum bestimmt. Betrachtet man eine  $D$ -dimensionale Riemann-Mannigfaltigkeit, die durch die krummlinigen Raumkoordinaten  $q^i$  mit  $i = 1, \dots, D$  parametrisiert ist und die Metrik  $g^{(i)ij}(q)$  besitzt, so lautet die Newton-Gleichung für die Bewegung einer Punktmasse  $m$  unter dem Einfluß eines skalaren Potentials  $V^{(i)}(q)$  und eines Vektorpotentials  $A_i^{(i)}(q)$  (vgl. Abschnitt 2.2.1):

$$m \ddot{q}^i(t) + m \Gamma_{jk}^{(i)i}(q(t)) \dot{q}^j(t) \dot{q}^k(t) = -g^{(i)ij}(q(t)) \partial_j V^{(i)}(q(t)) + g^{(i)ij}(q(t)) \dot{q}^k(t) \left\{ \partial_j A_k^{(i)}(q(t)) - \partial_k A_j^{(i)}(q(t)) \right\}. \quad (2.1)$$

Hierbei zeigt der obere Index (i) an, daß die einzelnen physikalischen Größen dem Ausgangssystem zugeordnet sind. Der Punkt  $\cdot$  bezeichnet die Ableitung nach der Zeitkoordinate  $t$  und das Christoffel-Symbol zweiter Art

$$\Gamma_{jk}^{(i)i}(q) = g^{(i)il}(q) \Gamma_{jki}^{(i)}(q) \quad (2.2)$$

ist über das Christoffel-Symbol erster Art

$$\Gamma_{jkl}^{(i)}(q) = \frac{1}{2} \left\{ \partial_j g_{kl}^{(i)}(q) + \partial_k g_{lj}^{(i)}(q) - \partial_l g_{jk}^{(i)}(q) \right\} \quad (2.3)$$

durch die Metrik  $g^{(i)ij}(q)$  festgelegt. Das erste Integral der Newton-Gleichung (2.1), der Energieerhaltungssatz, hängt nicht vom Vektorpotential  $A_i^{(i)}(q)$  ab:

$$\frac{m}{2} g_{ij}^{(i)}(q(t)) \dot{q}^i(t) \dot{q}^j(t) + V^{(i)}(q(t)) = E^{(i)}. \quad (2.4)$$

Da das betrachtete System konservativ und abgeschlossen ist, kann man noch über die Eichfreiheit verfügen, den Energienullpunkt beliebig vorzugeben. Im Hinblick auf die späteren Überlegungen im Rahmen der Lagrangeschen und der Hamiltonschen Mechanik erweist es sich dabei als sinnvoll, die Eichung des skalaren Potentials  $V^{(i)}(q)$  so zu wählen, daß die Energie  $E^{(i)}$  des Ausgangssystems verschwindet:

$$E^{(i)} = 0. \quad (2.5)$$

### 2.1.2 Transformation der Raumkoordinaten

In einem ersten Schritt werden die krummlinigen Raumkoordinaten  $q^i$  mit  $i = 1, \dots, D$  der Riemann-Mannigfaltigkeit durch die integrable Koordinatentransformation (1.19) in die krummlinigen Raumkoordinaten  $Q^\lambda$  mit  $\lambda = 1, \dots, D$  überführt. Dabei transformieren sich die Newton-Gleichung (2.1) und der Energieerhaltungssatz (2.4) mit der Konvention (2.5) unabhängig voneinander und das erste Integral der transformierten Newton-Gleichung

$$\begin{aligned} m \ddot{Q}^\lambda(t) + m \Gamma_{\mu\nu}^{(1)\lambda}(Q(t)) \dot{Q}^\mu(t) \dot{Q}^\nu(t) = & -g^{(1)\lambda\mu}(Q(t)) \partial_\mu V^{(1)}(Q(t)) \\ & + g^{(1)\lambda\mu}(Q(t)) \dot{Q}^\nu(t) \left\{ \partial_\mu A_\nu^{(1)}(Q(t)) - \partial_\nu A_\mu^{(1)}(Q(t)) \right\} \end{aligned} \quad (2.6)$$

entspricht gerade dem transformierten Energieerhaltungssatz

$$\frac{m}{2} g_{\mu\nu}^{(1)}(Q(t)) \dot{Q}^\mu(t) \dot{Q}^\nu(t) + V^{(1)}(Q(t)) = 0. \quad (2.7)$$

Das skalare Potential, das Vektorpotential und die Metrik transformieren sich wie ein Tensor nullter, erster und zweiter Stufe

$$V^{(1)}(Q) = V^{(i)}(q(Q)), \quad (2.8)$$

$$A_\lambda^{(1)}(Q) = e_\lambda^i(Q) A_i^{(i)}(q(Q)), \quad (2.9)$$

$$g^{(1)\lambda\mu}(Q) = e_i^\lambda(Q) e_j^\mu(Q) g^{(i)ij}(q(Q)), \quad (2.10)$$

während das Transformationsverhalten des Christoffel-Symbols zweiter Art von dem eines Tensors dritter Stufe abweicht:

$$\Gamma_{\mu\nu}^{(1)\lambda}(Q) = e_i^\lambda(Q) e_j^\mu(Q) e_k^\nu(Q) \Gamma_{jk}^{(i)i}(q(Q)) + e_i^\lambda(Q) \partial_\mu e_i^\nu(Q). \quad (2.11)$$

Es ist anzumerken, daß die Resultate (2.10) und (2.11) mit einem analog zu (2.2) und (2.3) definierten Zusammenhang zwischen dem Christoffel-Symbol zweiter Art  $\Gamma_{\mu\nu}^{(1)\lambda}(Q)$  und der Metrik  $g^{(1)\lambda\mu}(Q)$  konsistent sind, da die Koordinatentransformation (1.19) die Integrabilitätseigenschaft (1.18) besitzt.

### 2.1.3 Transformation der Zeitkoordinate

In einem zweiten Schritt soll eine Transformation vorgenommen werden, die die ursprüngliche Zeitkoordinate  $t$  betrifft. Man führt eine andere Zeitkoordinate  $s$  ein, die die Rolle der ursprünglichen Zeitkoordinate  $t$  als Parameter der Trajektorie im zugrunde liegenden Konfigurationsraum übernimmt. Wählt man hierzu den nichtintegrablen Ansatz (1.20), der als gewöhnliche Differentialgleichung

$$\frac{dt(s)}{ds} = f(Q(t(s))) \quad (2.12)$$

für die Beziehung  $t = t(s)$  zwischen beiden Zeitkoordinaten zu interpretieren ist, und reparametrisiert man die Trajektorie gemäß

$$Q^\lambda(s) = Q^\lambda(t(s)), \quad (2.13)$$

so wird die Standardform der Newton-Gleichung (2.6) zunächst einmal zerstört:

$$\begin{aligned} & m \overset{\circ}{\overset{\circ}{Q}}^\lambda(s) + m \Gamma_{\mu\nu}^{(1)\lambda}(Q(s)) \overset{\circ}{Q}^\mu(s) \overset{\circ}{Q}^\nu(s) \\ & - m \frac{\partial_\mu f(Q(s))}{f(Q(s))} \overset{\circ}{Q}^\mu(s) \overset{\circ}{Q}^\lambda(s) = -g^{(1)\lambda\mu}(Q(s)) f(Q(s))^2 \partial_\mu V^{(1)}(Q(s)) \\ & + g^{(1)\lambda\mu}(Q(s)) f(Q(s)) \overset{\circ}{Q}^\nu(s) \left\{ \partial_\mu A_\nu^{(1)}(Q(s)) - \partial_\nu A_\mu^{(1)}(Q(s)) \right\}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Hierbei kennzeichnet der neu eingeführte Punkt  $\circ$  die Ableitung nach der Zeitkoordinate  $s$ . In Gleichung (2.14) läßt sich zumindest partiell die Standardform der Newton-Gleichung reproduzieren, wenn man davon ausgeht, daß die nichtintegrablen Zeittransformation (1.20) das Vektorpotential nicht verändert

$$A_\lambda^{(f)}(Q) = A_\lambda^{(1)}(Q) \quad (2.15)$$

und daß sie zu einer konformen Abbildung der Metrik führt [82, S. 493]:

$$g^{(f)\lambda\mu}(Q) = f(Q) g^{(1)\lambda\mu}(Q). \quad (2.16)$$

Der obere Index (f) zeigt an, daß die einzelnen physikalischen Größen dem Endsystem zugeordnet sind. Beachtet man einen zu (2.2) und (2.3) analogen Zusammenhang zwischen dem Christoffel-Symbol zweiter Art  $\Gamma_{\mu\nu}^{(f)\lambda}(Q)$  und der Metrik  $g^{(f)\lambda\mu}(Q)$ , dann resultiert die Beziehung

$$\Gamma_{\mu\nu}^{(f)\lambda}(Q) = \Gamma_{\mu\nu}^{(1)\lambda}(Q) - \frac{\partial_\mu f(Q)}{2f(Q)} \delta_\nu^\lambda$$

$$- \frac{\partial_\nu f(Q)}{2f(Q)} \delta_\mu^\lambda + \frac{\partial_\kappa f(Q)}{2f(Q)} g^{(1)\lambda\kappa}(Q) g_{\mu\nu}^{(1)}(Q), \quad (2.17)$$

die zusammen mit einer Transformation des skalaren Potentials

$$V^{(f)}(Q) = f(Q) V^{(1)}(Q) \quad (2.18)$$

Gleichung (2.14) überführt in

$$\begin{aligned} m \overset{\circ\circ}{Q}^\lambda(s) + m \Gamma_{\mu\nu}^{(f)\lambda}(Q(s)) \overset{\circ}{Q}^\mu(s) \overset{\circ}{Q}^\nu(s) &= g^{(f)\lambda\mu}(Q(s)) \frac{\partial_\mu f(Q(s))}{f(Q(s))} V^{(f)}(Q(s)) \\ + m \frac{\partial_\kappa f(Q(s))}{2f(Q(s))} g^{(f)\lambda\kappa}(Q(s)) g_{\mu\nu}^{(f)}(Q(s)) \overset{\circ}{Q}^\mu(s) \overset{\circ}{Q}^\nu(s) &- g^{(f)\lambda\mu}(Q(s)) \partial_\mu V^{(f)}(Q(s)) \\ + g^{(f)\lambda\mu}(Q(s)) \overset{\circ}{Q}^\nu(s) \{ \partial_\mu A_\nu^{(f)}(Q(s)) - \partial_\nu A_\mu^{(f)}(Q(s)) \}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Man kann sich nun eines Kunstgriffes bedienen, der ursprünglich von Poincaré [105], [118, S. 35] im Rahmen der Himmelsmechanik eingeführt wurde und der dann von Sundman [126], Kustaanheimo und Stiefel [88] sowie Kirchgraber und Stiefel [77, S. 70] wieder aufgegriffen wurde. Hierzu unterzieht man neben der Newton-Gleichung (2.6) auch deren erstes Integral (2.7) der nichtintegrablen Zeittransformation (1.20) und erhält das Ergebnis

$$E^{(f)} = \frac{m}{2} g_{\mu\nu}^{(f)}(Q(s)) \overset{\circ}{Q}^\mu(s) \overset{\circ}{Q}^\nu(s) + V^{(f)}(Q(s)) = 0, \quad (2.20)$$

das heißt, daß auch die Energie  $E^{(f)}$  des Endsystems verschwindet. Nach (2.19) und (2.20) ist die Newton-Gleichung unter der nichtintegrablen Zeittransformation (1.20) invariant und das erste Integral der transformierten Newton-Gleichung

$$\begin{aligned} m \overset{\circ\circ}{Q}^\lambda(s) + m \Gamma_{\mu\nu}^{(f)\lambda}(Q(s)) \overset{\circ}{Q}^\mu(s) \overset{\circ}{Q}^\nu(s) &= -g^{(f)\lambda\mu}(Q(s)) \partial_\mu V^{(f)}(Q(s)) \\ + g^{(f)\lambda\mu}(Q(s)) \overset{\circ}{Q}^\nu(s) \{ \partial_\mu A_\nu^{(f)}(Q(s)) - \partial_\nu A_\mu^{(f)}(Q(s)) \} \end{aligned} \quad (2.21)$$

stimmt mit dem transformierten Energieerhaltungssatz (2.20) überein.

## 2.2 Lagrangesche Mechanik

Arbeitet man die nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen (1.19) und (1.20) in die Lagrangesche Mechanik ein, so treten ebenfalls Schwierigkeiten auf. Dabei hat man insbesondere zu untersuchen, wie die Transformation der Zeitkoordinate die Variationsmethode des Hamiltonschen Prinzips modifiziert. Dank der möglichen Konvention, daß die Energie des Ausgangssystems verschwindet, gelingt es jedoch schließlich, auch die Invarianz des Hamiltonschen Prinzips nachzuweisen.

### 2.2.1 Hamiltonsches Prinzip

Im Rahmen der Lagrangeschen Formulierung der klassischen Mechanik wird die Bewegung einer Punktmasse  $m$  auf einer  $D$ -dimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit mit der Metrik  $g_{ij}^{(i)}(q)$  unter dem Einfluß eines skalaren Potentials  $V^{(i)}(q)$  und eines Vektorpotentials  $A_i^{(i)}(q)$  durch die Wirkung  $\mathcal{A}^{(i)}[q^i(t)]$  bestimmt, die ein Funktional der Trajektorie  $q^i(t)$  im betrachteten Zeitintervall  $[t_1, t_2]$  darstellt:

$$\mathcal{A}^{(i)}[q^i(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L^{(i)}(q^i(t); \dot{q}^i(t)) dt. \quad (2.22)$$

Die Lagrange-Funktion dieses konservativen und abgeschlossenen Systems ist gegeben durch [82, S. 401 u. S. 420]

$$L^{(i)}(q^i; \dot{q}^i) = \frac{m}{2} g_{ij}^{(i)}(q) \dot{q}^i \dot{q}^j - V^{(i)}(q) + \dot{q}^i A_i^{(i)}(q). \quad (2.23)$$

Das Argument  $q$  in der kovarianten Metrik und in den Potentialen steht für die Gesamtheit der Raumkoordinaten  $q^i$ . Das Hamiltonsche Prinzip ermöglicht es, die Bewegungsgleichung dieser Punktmasse  $m$  mit Hilfe der Methode der Variationsrechnung zu bestimmen. Die physikalisch realisierte Trajektorie  $q^i(t)$  im Konfigurationsraum ist dabei dadurch ausgezeichnet, daß sie die Variation der Wirkung  $\mathcal{A}^{(i)}[q^i(t)]$  annulliert:

$$\delta \mathcal{A}^{(i)}[q^i(t)] = 0. \quad (2.24)$$

Hierbei schreibt das Hamiltonsche Prinzip vor, die Variation der Wirkung  $\mathcal{A}^{(i)}[q^i(t)]$  unter der Nebenbedingung durchzuführen, daß alle Variationen der Zeitkoordinate  $t$  und der Raumkoordinaten  $q^i$  an den beiden vorgegebenen Endpunkten 1 und 2 verschwinden (vgl. Abbildung 2.1):

$$\delta t_1 = \delta t_2 = 0, \quad \delta q_1^i = \delta q_2^i = 0. \quad (2.25)$$

Die Anwendung des Hamiltonschen Prinzips (2.24) und (2.25) auf die Wirkung (2.22) führt zur Euler-Lagrange-Gleichung

$$\frac{\partial L^{(i)}(q^i(t); \dot{q}^i(t))}{\partial q^j(t)} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L^{(i)}(q^i(t); \dot{q}^i(t))}{\partial \dot{q}^j(t)} = 0. \quad (2.26)$$

Beachtet man, daß das Christoffel-Symbol zweiter Art  $\Gamma_{jk}^{(i)i}(q)$  gemäß (2.2) und (2.3) durch die Metrik  $g^{(i)ij}(q)$  festgelegt ist, so reduziert sich die Euler-Lagrange-Gleichung (2.26) für die Lagrange-Funktion (2.23) auf die Newton-Gleichung (2.1).

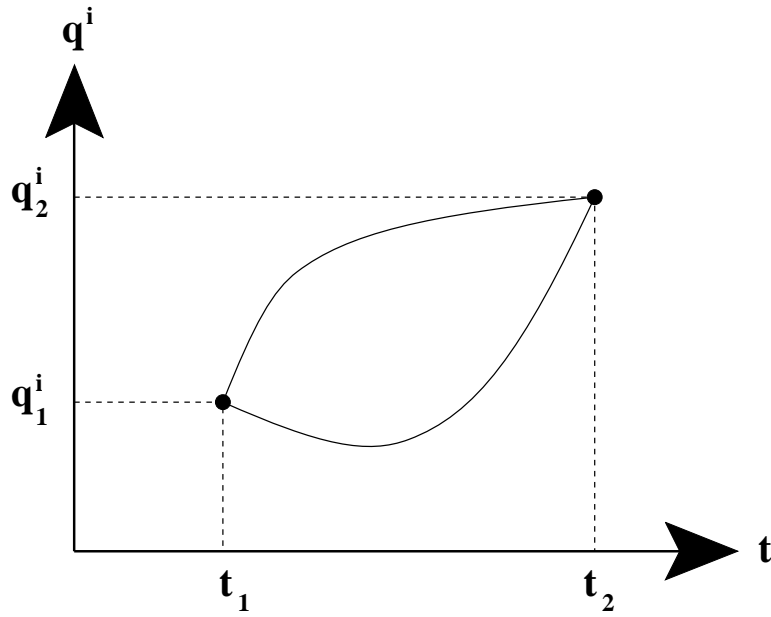


Abbildung 2.1: Variationen der Trajektorie, die nach der gewöhnlichen Formulierung des Hamiltonschen Prinzips der Lagrangeschen Mechanik zugelassen sind. An den Endpunkten 1 und 2 der Trajektorien ist der Trajektorienparameter  $t$  festgelegt.

### 2.2.2 Transformation der Raumkoordinaten

Durch einen Wechsel der krummlinigen Raumkoordinaten auf der  $D$ -dimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit gemäß (1.19) wird die Wirkung  $\mathcal{A}^{(i)}[q^i(t)]$ , die nach (2.22) ein Funktional der ursprünglichen Trajektorie  $q^i(t)$  darstellt, in ein Funktional  $\mathcal{A}^{(1)}[Q^\lambda(t)]$  der neuen Trajektorie  $Q^\lambda(t)$  überführt

$$\mathcal{A}^{(1)}[Q^\lambda(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L^{(1)}(Q^\lambda(t); \dot{Q}^\lambda(t)) dt, \quad (2.27)$$

wobei die transformierte Lagrange-Funktion gegeben ist durch

$$L^{(1)}(Q^\lambda; \dot{Q}^\lambda) = L^{(i)}(q^i(Q); e^i_\lambda(Q) \dot{Q}^\lambda). \quad (2.28)$$

Im Falle der Lagrange-Funktion (2.23) erhält man mit den Definitionen (2.8)–(2.10):

$$L^{(1)}(Q^\lambda; \dot{Q}^\lambda) = \frac{m}{2} g_{\lambda\mu}^{(1)}(Q) \dot{Q}^\lambda \dot{Q}^\mu - V^{(1)}(Q) + \dot{Q}^\lambda A_\lambda^{(1)}(Q). \quad (2.29)$$

Die integrable Koordinatentransformation (1.19) bewirkt ferner, daß die im Hamiltonschen Prinzip auftretenden Variationen (2.24) und (2.25) wie folgt transformiert werden:

$$\delta \mathcal{A}^{(1)}[Q^\lambda(t)] = 0, \quad (2.30)$$



$$\delta t_1 = \delta t_2 = 0, \quad \delta Q_1^\lambda = \delta Q_2^\lambda = 0. \quad (2.31)$$

Demnach führt das transformierte Hamiltonsche Prinzip (2.30) und (2.31) mit der transformierten Wirkung (2.27) auf die Euler-Lagrange-Gleichung

$$\frac{\partial L^{(1)}(Q^\lambda(t); \dot{Q}^\lambda(t))}{\partial Q^\mu(t)} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L^{(1)}(Q^\lambda(t); \dot{Q}^\lambda(t))}{\partial \dot{Q}^\mu(t)} = 0, \quad (2.32)$$

die für die transformierte Lagrange-Funktion (2.29) mit der transformierten Newton-Gleichung (2.6) übereinstimmt.

### 2.2.3 Transformation der Zeitkoordinate

Die Konsequenzen der nichtintegrablen Transformation (1.20) müssen in der Lagrangeschen Mechanik sorgfältig untersucht werden, da hiervon die Zeitkoordinate  $t$  als Parameter der Trajektorie im zugrunde liegenden Konfigurationsraum betroffen ist. Mit der natürlichen Reparametrisierung der Trajektorie gemäß (2.13) erhält man aus (2.27) eine Wirkung  $\mathcal{A}^{(f)}[Q^\lambda(s)]$ , die ein Funktional der Trajektorie  $Q^\lambda(s)$  darstellt

$$\mathcal{A}^{(f)}[Q^\lambda(s)] = \int_{s_1}^{s_2} L^{(f)}\left(Q^\lambda(s); \overset{\circ}{Q}^\lambda(s)\right) ds, \quad (2.33)$$

und die transformierte Lagrange-Funktion lautet

$$L^{(f)}\left(Q^\lambda; \overset{\circ}{Q}^\lambda\right) = f(Q) L^{(1)}\left(Q^\lambda; \frac{1}{f(Q)} \overset{\circ}{Q}^\lambda\right). \quad (2.34)$$

Demnach geht die Lagrange-Funktion (2.29) unter Beachtung der Definitionen (2.15), (2.16) und (2.18) über in

$$L^{(f)}\left(Q^\lambda; \overset{\circ}{Q}^\lambda\right) = \frac{m}{2} g_{\lambda\mu}^{(f)}(Q) \overset{\circ}{Q}^\lambda \overset{\circ}{Q}^\mu - V^{(f)}(Q) + \overset{\circ}{Q}^\lambda A_\lambda^{(f)}(Q). \quad (2.35)$$

Transformiert man entsprechend die Aussagen des Hamiltonschen Prinzips (2.30) und (2.31), so hat man zu verlangen, daß die Variation der transformierten Wirkung  $\mathcal{A}^{(f)}[Q^\lambda(s)]$  annulliert wird

$$\delta \mathcal{A}^{(f)}[Q^\lambda(s)] = 0, \quad (2.36)$$

wobei die Variationen der Raumkoordinaten  $Q^\lambda$  an den Endpunkten 1 und 2 verschwinden:

$$\delta Q_1^\lambda = \delta Q_2^\lambda = 0. \quad (2.37)$$

Demgegenüber müssen aber die Variationen der Zeitkoordinate  $s$  an den Endpunkten 1 und 2 nicht verschwinden. Interpretiert man nämlich die nichtintegrierte Zeittransformation (1.20) als eine gewöhnliche Differentialgleichung (2.12) für die Beziehung  $t = t(s)$  zwischen den beiden Zeitkoordinaten  $t$  und  $s$ , so erhält man mit (2.13) für die beiden Endpunkte  $j = 1, 2$ :

$$t_j = \int_0^{s_j} f(Q(s)) ds. \quad (2.38)$$

Führt man dann auf beiden Seiten von (2.38) die Variation durch, so sind wegen (2.31) die Variationen  $\delta s_j$  an den Endpunkten  $j = 1, 2$  ein Funktional der Variationen  $\delta Q^\lambda(s)$  der Raumkoordinaten

$$\delta s_j = -\frac{1}{f(Q(s_j))} \int_0^{s_j} \delta Q^\lambda(s) \partial_\lambda f(Q(s)) ds \quad (2.39)$$

und daher im allgemeinen von Null verschieden. Dies wirft die Frage auf, ob sich die nichtverschwindenden Variationen (2.39) auf die Bewegungsgleichung der Trajektorie  $Q^\lambda(s)$  auswirken. Um dies festzustellen, kann man die Standardmethoden der Variationsrechnung [121, S. 205] anwenden und erhält für die Variation der Wirkung (2.33) unter den Nebenbedingungen (2.37) und (2.39):

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{A}^{(f)}[Q^\lambda(s)] = & \int_{s_1}^{s_2} \left\{ \frac{\partial L^{(f)}(Q^\lambda(s); \overset{\circ}{Q}^\lambda(s))}{\partial Q^\mu(s)} - \frac{d}{ds} \frac{\partial L^{(f)}(Q^\lambda(s); \overset{\circ}{Q}^\lambda(s))}{\partial \overset{\circ}{Q}^\mu(s)} \right\} \delta Q^\mu(s) ds \\ & + \left[ \left\{ L^{(f)}(Q^\lambda(s_j); \overset{\circ}{Q}^\lambda(s_j)) - \overset{\circ}{Q}^\mu(s_j) \frac{\partial L^{(f)}(Q^\lambda(s_j); \overset{\circ}{Q}^\lambda(s_j))}{\partial \overset{\circ}{Q}^\mu(s_j)} \right\} \delta s_j \right]_{j=1}^{j=2}. \quad (2.40) \end{aligned}$$

Die Randbeiträge zur Variation der Wirkung werden dabei von der Legendre-Transformierten der Lagrange-Funktion, der Hamilton-Funktion, bestimmt:

$$H^{(f)}(Q^\lambda; \overset{\circ}{Q}^\lambda) = \overset{\circ}{Q}^\mu \frac{\partial L^{(f)}(Q^\lambda; \overset{\circ}{Q}^\lambda)}{\partial \overset{\circ}{Q}^\mu} - L^{(f)}(Q^\lambda; \overset{\circ}{Q}^\lambda). \quad (2.41)$$

Aus der Form der Lagrange-Funktion (2.35) und des Energieerhaltungssatzes (2.20) folgt, daß diese Hamilton-Funktion identisch verschwindet:

$$H^{(f)}(Q^\lambda; \overset{\circ}{Q}^\lambda) = \frac{m}{2} g_{\mu\nu}^{(f)}(Q) \overset{\circ}{Q}^\mu \overset{\circ}{Q}^\nu + V^{(f)}(Q) = 0. \quad (2.42)$$

Deshalb führt das Hamiltonsche Prinzip (2.36), (2.37) und (2.39) zur Euler-Lagrange-Gleichung

$$\frac{\partial L^{(f)}\left(Q^\lambda(s); \overset{\circ}{Q}^\lambda(s)\right)}{\partial Q^\mu(s)} - \frac{d}{ds} \frac{\partial L^{(f)}\left(Q^\lambda(s); \overset{\circ}{Q}^\lambda(s)\right)}{\partial \overset{\circ}{Q}^\mu(s)} = 0, \quad (2.43)$$

die mit der Lagrange-Funktion (2.35) in die Newton-Gleichung (2.21) übergeht.

## 2.3 Hamiltonsche Mechanik

Führt man die nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen auch in der Hamiltonschen Mechanik durch, so kann man untersuchen, inwieweit dadurch die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen verändert werden. Dabei zeigt es sich, daß deren symplektische Struktur [77, S. 112] sowohl unter den kanonischen Raumtransformationen (1.19) als auch unter den nichtkanonischen Zeittransformationen (1.20) erhalten bleibt.

### 2.3.1 Modifiziertes Hamiltonsches Prinzip

Im Rahmen der Hamiltonschen Formulierung der klassischen Mechanik werden die Raumkoordinaten  $q^i$  und ihre kanonisch konjugierten Impulskoordinaten

$$p_j = \frac{\partial L^{(i)}(q^i; \dot{q}^i)}{\partial \dot{q}^j} \quad (2.44)$$

als unabhängige Variablen aufgefaßt. Setzt man voraus, daß die durch (2.44) definierte Beziehung

$$p_j = p_j(q^i; \dot{q}^i) \quad (2.45)$$

zwischen den Impulskoordinaten  $p_j$  und den Geschwindigkeitskoordinaten  $\dot{q}^i$  invertiert werden kann

$$\dot{q}^j = \dot{q}^j(q^i; p_i), \quad (2.46)$$

dann wird die Wirkung (2.22) zu einem Funktional der Trajektorie  $q^i(t)$ ,  $p_i(t)$  im Phasenraum

$$\mathcal{A}^{(i)}[q^i(t); p_i(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \left\{ \dot{q}^i(t) p_i(t) - H^{(i)}(q^i(t); p_i(t)) \right\} dt. \quad (2.47)$$

Hierbei geht die Hamilton-Funktion  $H^{(i)}(q^i; p_i)$  durch eine Legendre-Transformation aus der Lagrange-Funktion  $L^{(i)}(q^i; \dot{q}^i)$  hervor:

$$H^{(i)}(q^i; p_i) = \dot{q}^j(q^i; p_i) p_j - L^{(i)}(q^j; \dot{q}^j(q^i; p_i)). \quad (2.48)$$

Ferner wird die physikalisch realisierte Trajektorie  $q^i(t), p_i(t)$  im Phasenraum durch eine Modifikation des ursprünglichen Hamiltonschen Prinzips (2.24) und (2.25) festgelegt. In der Hamiltonschen Mechanik verlangt man, daß die Variation der Wirkung  $\mathcal{A}^{(i)}[q^i(t); p_i(t)]$  annulliert wird

$$\delta \mathcal{A}^{(i)}[q^i(t); p_i(t)] = 0, \quad (2.49)$$

wobei die Variationen der Zeitkoordinate  $t$  und der Raumkoordinaten  $q^i$  an den beiden vorgegebenen Endpunkten 1 und 2 entsprechend (2.25) verschwinden. Für die Variationen der kanonisch konjugierten Impulskoordinaten  $p_i$  an den Endpunkten 1 und 2 werden dagegen keinerlei Einschränkungen vorgeschrieben. Das modifizierte Hamiltonsche Prinzip führt demnach auf die Hamilton-Gleichungen

$$\dot{q}^j(t) = + \frac{\partial H^{(i)}(q^i(t); p_i(t))}{\partial p_j(t)}, \quad (2.50)$$

$$\dot{p}_j(t) = - \frac{\partial H^{(i)}(q^i(t); p_i(t))}{\partial q^j(t)}. \quad (2.51)$$

Betrachtet man das konservative und abgeschlossene System (2.23), so erhält man nach (2.44) für die kanonisch konjugierten Impulskoordinaten

$$p_i = m g_{ij}^{(i)}(q) \dot{q}^j + A_i^{(i)}(q) \quad (2.52)$$

und die Hamilton-Funktion  $H^{(i)}(q^i; p_i)$  ergibt sich zu

$$H^{(i)}(q^i; p_i) = \frac{1}{2m} g^{(i)ij}(q) (p_i - A_i^{(i)}(q)) (p_j - A_j^{(i)}(q)) + V^{(i)}(q). \quad (2.53)$$

Die Hamilton-Gleichungen (2.50) und (2.51) stimmen für die Hamilton-Funktion (2.53) mit der Newton-Gleichung (2.1) überein.

### 2.3.2 Transformation der Raumkoordinaten

Ein integrierbarer Wechsel (1.19) der krummlinigen Raumkoordinaten führt unmittelbar auf eine entsprechende Transformation der Impulskoordinaten. Dazu werden

neben den Raumkoordinaten  $Q^\lambda$  auch die kanonisch konjugierten Impulskoordinaten

$$P_\mu = \frac{\partial L^{(1)}(Q^\lambda; \dot{Q}^\lambda)}{\partial \dot{Q}^\mu} \quad (2.54)$$

als neue unabhängige Variablen aufgefaßt. Aus (2.28), (2.44) und (2.54) ist abzulesen, daß sich die Impulskoordinaten wie ein Tensor erster Stufe transformieren:

$$p_j = p_j(Q; P) = e_j^\mu(Q) P_\mu. \quad (2.55)$$

Die integrable Raumtransformation (1.19) und die Transformation der Impulskoordinaten (2.55) bilden insgesamt eine kanonische Transformation, da sie die fundamentalen Poisson-Klammern nicht verändern:

$$\{q^i(Q), q^j(Q)\}_{Q,P} = 0, \quad (2.56)$$

$$\{p_i(Q; P), p_j(Q; P)\}_{Q,P} = 0, \quad (2.57)$$

$$\{q^i(Q), p_j(Q; P)\}_{Q,P} = \delta^i_j. \quad (2.58)$$

Hierbei wird die übliche Definition der Poisson-Klammer verwendet:

$$\{F(Q; P), G(Q; P)\}_{Q,P} = \frac{\partial F(Q; P)}{\partial Q^\mu} \frac{\partial G(Q; P)}{\partial P_\mu} - \frac{\partial F(Q; P)}{\partial P_\mu} \frac{\partial G(Q; P)}{\partial Q^\mu}. \quad (2.59)$$

Durch die kanonische Transformation (1.19) und (2.55) wird die ursprüngliche Wirkung  $\mathcal{A}^{(i)}[q^i(t); p_i(t)]$  in (2.47) zu einem Funktional der transformierten Trajektorie  $Q^\lambda(t), P_\lambda(t)$  im Phasenraum

$$\mathcal{A}^{(1)}[Q^\lambda(t); P_\lambda(t)] = \int_{t_1}^{t_2} \{ \dot{Q}^\lambda(t) P_\lambda(t) - H^{(1)}(Q^\lambda(t); P_\lambda(t)) \} dt, \quad (2.60)$$

wobei die transformierte Hamilton-Funktion gegeben ist durch

$$H^{(1)}(Q^\lambda; P_\lambda) = H^{(i)}(q^i(Q); e_i^\lambda(Q) P_\lambda). \quad (2.61)$$

Im Falle des konservativen und abgeschlossenen Systems (2.53) reduziert sich die transformierte Hamilton-Funktion (2.61) mit den Definitionen (2.8)–(2.10) auf die Legendre-Transformierte der transformierten Lagrange-Funktion (2.29):

$$H^{(1)}(Q^\lambda; P_\lambda) = \frac{1}{2m} g^{(1)\lambda\mu}(Q) (P_\lambda - A_\lambda^{(1)}(Q)) (P_\mu - A_\mu^{(1)}(Q)) + V^{(1)}(Q). \quad (2.62)$$

Die kanonische Transformation (1.19) und (2.55) bewirkt ferner, daß das modifizierte Hamiltonsche Prinzip nun aus der Forderung

$$\delta \mathcal{A}^{(1)}[Q^\lambda(t); P_\lambda(t)] = 0 \quad (2.63)$$

und der Nebenbedingung (2.31) besteht. Demnach bleibt die symplektische Struktur [77, S. 112] der Hamilton-Gleichungen (2.50) und (2.51) auch für die transformierte Trajektorie  $Q^\lambda(t)$ ,  $P_\lambda(t)$  erhalten:

$$\dot{Q}^\mu(t) = + \frac{\partial H^{(1)}(Q^\lambda(t); P_\lambda(t))}{\partial P_\mu(t)}, \quad (2.64)$$

$$\dot{P}_\mu(t) = - \frac{\partial H^{(1)}(Q^\lambda(t); P_\lambda(t))}{\partial Q^\mu(t)}. \quad (2.65)$$

Für die transformierte Hamilton-Funktion (2.62) sind die entsprechenden Hamilton-Gleichungen (2.64) und (2.65) mit der transformierten Newton-Gleichung (2.6) identisch.

### 2.3.3 Transformation der Zeitkoordinate

Führt man die nichtintegrale Zeittransformation (1.20) durch, so werden nicht nur die Raumkoordinaten  $Q^\lambda$  gemäß (2.13) reparametrisiert. Aus der Transformation der Lagrange-Funktion (2.34) geht hervor, daß auch die kanonisch konjugierten Impulskoordinaten

$$P_\mu = \frac{\partial L^{(f)}(Q^\lambda; \overset{\circ}{Q}^\lambda)}{\partial \overset{\circ}{Q}^\mu} \quad (2.66)$$

eine Reparametrisierung erfahren:

$$P_\mu(s) = P_\mu(t(s)). \quad (2.67)$$

Demnach geht die Wirkung (2.60) über in

$$\mathcal{A}^{(f)}[Q^\lambda(s); P_\lambda(s)] = \int_{s_1}^{s_2} \left\{ \overset{\circ}{Q}^\lambda(s) P_\lambda(s) - H^{(f)}(Q^\lambda(s); P_\lambda(s)) \right\} ds, \quad (2.68)$$

wobei sich die transformierte Hamilton-Funktion  $H^{(f)}(Q^\lambda; P_\lambda)$  nach folgender Vorschrift berechnet:

$$H^{(f)}(Q^\lambda; P_\lambda) = f(Q) H^{(1)}(Q^\lambda; P_\lambda). \quad (2.69)$$

Im Falle des konservativen und abgeschlossenen Systems (2.62) erhält man unter Beachtung der Definitionen (2.15), (2.16) und (2.18) gerade die Legendre-Transformierte der transformierten Lagrange-Funktion (2.35):

$$H^{(f)}(Q^\lambda; P_\lambda) = \frac{1}{2m} g^{(f)\lambda\mu}(Q) (P_\lambda - A_\lambda^{(f)}(Q)) (P_\mu - A_\mu^{(f)}(Q)) + V^{(f)}(Q). \quad (2.70)$$

Nach Durchführung der nichtintegrablen Zeittransformation (1.20) besteht das modifizierte Hamiltonsche Prinzip aus der Forderung

$$\delta \mathcal{A}^{(f)}[Q^\lambda(s); P_\lambda(s)] = 0 \quad (2.71)$$

sowie den beiden Nebenbedingungen (2.37) und (2.39) für die Variationen der Raumkoordinaten  $Q^\lambda$  und der Zeitkoordinate  $s$ . Analog zum Vorgehen in der Lagrange-Mechanik kann man auch in der Hamiltonschen Mechanik untersuchen, ob sich die gemäß (2.39) nichtverschwindenden Variationen  $\delta s_j$  an den Endpunkten  $j = 1, 2$  auf die Bewegungsgleichungen auswirken. Es zeigt sich, daß die Variation der Wirkung (2.68) unter den Nebenbedingungen (2.37) und (2.39)

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{A}^{(f)}[Q^\lambda(s); P_\lambda(s)] = & \int_{s_1}^{s_2} \left\{ \left[ \overset{\circ}{Q}^\mu(s) - \frac{\partial H^{(f)}(Q^\lambda(s); P_\lambda)}{\partial P_\mu(s)} \right] \delta P_\mu(s) - \left[ \overset{\circ}{P}_\mu(s) \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\partial H^{(f)}(Q^\lambda(s); P_\lambda)}{\partial Q^\mu(s)} \right] \delta Q^\mu(s) \right\} ds + \left[ -H^{(f)}(Q^\lambda(s_j); P_\lambda(s_j)) \delta s_j \right]_{j=1}^{j=2} \end{aligned} \quad (2.72)$$

nicht von den Randbeiträgen abhängt, da die Hamilton-Funktion (2.70) gemäß (2.42) identisch verschwindet. Demnach ist die symplektische Struktur [77, S. 112] der Hamilton-Gleichungen auch unter der nichtintegrablen Zeittransformation (1.20) invariant:

$$\overset{\circ}{Q}^\mu(s) = + \frac{\partial H^{(f)}(Q^\lambda(s); P_\lambda(s))}{\partial P_\mu(s)}, \quad (2.73)$$

$$\overset{\circ}{P}_\mu(s) = - \frac{\partial H^{(f)}(Q^\lambda(s); P_\lambda(s))}{\partial Q^\mu(s)}. \quad (2.74)$$

Es bleibt anzumerken, daß sich diese Hamilton-Gleichungen für die transformierte Hamilton-Funktion (2.70) auf die transformierte Newton-Gleichung (2.21) reduzieren.

## 2.4 Zusammenfassung der Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die bisher im Rahmen der klassischen Mechanik gewonnenen Ergebnisse zusammengefaßt und näher erläutert, um spätere Anwendungen zu erleichtern. Der Einfachheit halber soll dabei die Darstellung auf die Newtonsche Formulierung der klassischen Mechanik beschränkt werden.

Betrachten wir das grundlegende Problem, die Trajektorie  $q^i(t)$  einer Punktmasse  $m$  zu bestimmen, die sich auf einer  $D$ -dimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit mit der Metrik  $g^{(i)ij}(q)$  unter dem Einfluß des skalaren Potentials  $V^{(i)}(q)$  und des Vektorpotentials  $A_i^{(i)}(q)$  bewegt. Um dieses Problem zu lösen, versucht man gewöhnlich, die Newton-Gleichung (2.1) unter Beachtung der Anfangsbedingungen

$$q_0^i = q^i(0), \quad \dot{q}_0^i = \dot{q}^i(0) \quad (2.75)$$

direkt zu integrieren. Die nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen (1.19) und (1.20) stellen nun aber eine weitere Lösungsstrategie zur Verfügung. Sie erlauben es, die Berechnung der ursprünglichen Trajektorie  $q^i(t)$  auf die Bestimmung einer anderen Trajektorie  $Q^\lambda(s)$  abzubilden, die die Bewegung einer Punktmasse  $m$  auf einer  $D$ -dimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit mit der Metrik  $g^{(f)\lambda\mu}(Q)$  unter dem Einfluß des skalaren Potentials  $V^{(f)}(Q)$  und des Vektorpotentials  $A_\lambda^{(f)}(Q)$  beschreibt:

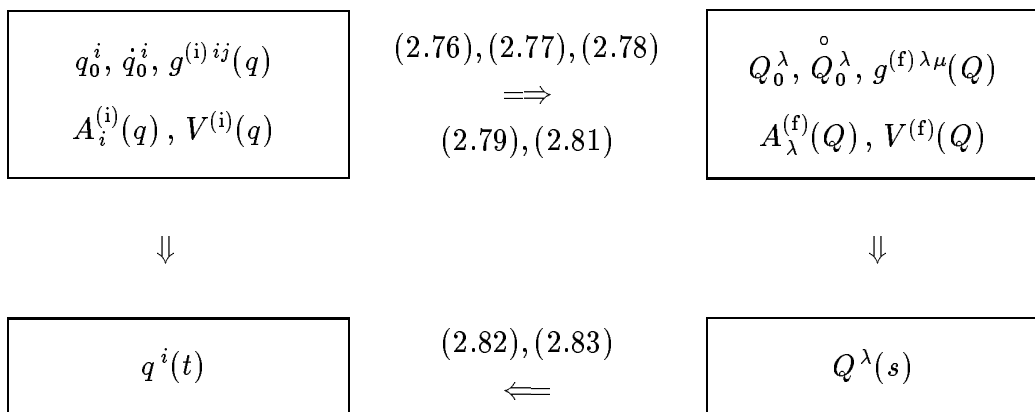


Abbildung 2.2: Eine nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformation führt zu einer Abbildung zwischen zwei Systemen der klassischen Mechanik. Dabei transformieren sich die Anfangsbedingungen, die Metrik, die äußeren Felder und die Trajektorie des einen Systems in die entsprechenden Größen des anderen Systems.

Nach (1.19) und (1.20) transformieren sich die Anfangsbedingungen gemäß

$$Q_0^\lambda = Q^\lambda(q_0), \quad (2.76)$$

$$\overset{\circ}{Q}_0^\lambda = f(Q_0) e_i^\lambda(Q_0) \dot{q}_0^i, \quad (2.77)$$



während die Transformationen der Metrik und des Vektorpotentials nach (2.9), (2.10), (2.15) und (2.16) gegeben sind durch

$$g^{(f)\lambda\mu}(Q) = f(Q) e_i^\lambda(Q) e_j^\mu(Q) g^{(i)ij}(q(Q)) , \quad (2.78)$$

$$A_\lambda^{(f)}(Q) = e^\lambda_i(Q) A_i^{(i)}(q(Q)) . \quad (2.79)$$

Ist das skalare Potential  $V^{(i)}(q)$  des Ausgangssystems so geeicht, daß dessen Energie  $E^{(i)}$  verschwindet (vgl. Abschnitt 2.1.1), dann transformiert es sich nach (2.8) und (2.18) mit

$$V^{(f)}(Q) = f(Q) V^{(i)}(q(Q)) . \quad (2.80)$$

Falls diese spezielle Eichung des skalaren Potentials  $V^{(i)}(q)$  nicht vorliegen sollte, kann man sie aber auch nachträglich vornehmen, indem man (2.80) durch

$$V^{(f)}(Q) = f(Q) \{V^{(i)}(q(Q)) - E^{(i)}\} \quad (2.81)$$

ersetzt. Kennt man die Trajektorie  $Q^\lambda(s)$  des anderen Problems, dann läßt sich die Trajektorie  $q^i(t)$  des ursprünglichen Problems berechnen. Die Rücktransformation ist durch die nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformation (1.19) und (1.20) definiert:

$$q^i(t) = q^i(Q(s(t))) . \quad (2.82)$$

Die hierbei benötigte Beziehung  $s = s(t)$  zwischen beiden Zeitkoordinaten ergibt sich nach (2.12), (2.13) durch Lösen der impliziten Gleichung

$$t = \int_0^{s(t)} f(Q(\sigma)) d\sigma \quad (2.83)$$

und ist demnach letztendlich erst durch die Kenntnis der Trajektorie  $Q^\lambda(s)$  des Endsystems festgelegt. Dies unterstreicht, daß (1.20) eine lokale Zeittransformation darstellt.

*Wenn in einer Sintflut alle wissenschaftlichen  
Kenntnisse zerstört würden ... , welche Aussage  
würde die größte Information in den wenigsten  
Worten enthalten? Ich bin davon überzeugt,  
daß dies die Atomhypothese wäre ... .*  
R.P. Feynman (1918 – 1988)

## Kapitel 3

# Quantenmechanik

Nachdem im vorangegangenen Kapitel die Forminvarianz der klassischen Mechanik unter nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen untersucht worden ist, sollen in diesem Kapitel entsprechende Überlegungen auch in der Quantenmechanik durchgeführt werden. Der Unterschied zwischen beiden physikalischen Theorien manifestiert sich dabei dadurch, daß die resultierenden Transformationsvorschriften für die jeweiligen physikalischen Größen teilweise voneinander abweichen.

Im folgenden wird auch in der Quantenmechanik das abgeschlossene System einer nichtrelativistischen Punktmasse untersucht, die sich auf einer Riemann-Mannigfaltigkeit unter dem Einfluß äußerer Felder bewegt. In der Schrödingerschen Quantenmechanik (Abschnitt 3.1), in der Feynmanschen Quantenmechanik (Abschnitt 3.2) und in der Heisenbergschen Quantenmechanik (Abschnitt 3.3) wird zunächst gezeigt, daß die Bewegungsgleichung dieser Punktmasse aufgrund des Kovarianzprinzips unter den integralen Raumtransformationen (1.19) forminvariant bleibt. Anschließend wird mit Hilfe von Fouriertransformationen nachgewiesen, daß sich diese Forminvarianz auch auf die nichtintegralen Zeittransformationen (1.20) ausdehnen läßt. Aus der Zusammenfassung in Abschnitt 3.4 geht hervor, daß die quantenmechanischen Transformationen der Metrik und des Vektorpotentials mit den klassischen übereinstimmen. Demgegenüber enthält die quantenmechanische Transformation des skalaren Potentials neben dem klassischen Beitrag noch einen zusätzlichen Term, der vom Quadrat des Planckschen Wirkungsquantums abhängt. Anhang B zeigt unter Verwendung der Riemann-Cartan-Differentialgeometrie, daß dieser zusätzliche Term mit derjenigen Krümmung und Torsion der Raum-Zeit-Struktur übereinstimmt, die durch die nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation (1.19), (1.20) hervorgerufen wird.

## 3.1 Schrödingersche Quantenmechanik

Im vorliegenden Abschnitt wird zunächst diskutiert, wie sich das Operatorordnungsproblem, das bei der Quantisierung klassischer Systeme auftreten kann, mit Hilfe des Kovarianzprinzips lösen läßt. Anschließend wird die Schrödingersche Formulierung der Quantenmechanik entwickelt, indem das darstellungsfreie Schrödingersche Anfangswertproblem in die Ortsdarstellung überführt wird. Dabei zeigt es sich aufgrund des Kovarianzprinzips, daß die Schrödingersche Quantenmechanik unter den integralen Raumtransformationen (1.19) forminvariant ist. Anschließend wird in Anlehnung an die Arbeiten [100, 101] gezeigt, daß die Schrödingersche Quantenmechanik darüber hinaus auch unter den nichtintegralen Zeittransformationen (1.20) forminvariant ist.

### 3.1.1 Zur Quantisierung klassischer Systeme

Quantisiert man ein klassisches System, so werden den Raumkoordinaten  $q^i$  und den dazu kanonisch konjugierten Impulskoordinaten  $p_i$  lineare, hermitesche Operatoren  $\hat{q}^i$  und  $\hat{p}_i$  zugeordnet. Dabei sind die fundamentalen Poisson-Klammern

$$\{q^i, q^j\}_{q,p} = \{p_i, p_j\}_{q,p} = 0, \quad \{q^i, p_j\}_{q,p} = \delta^i_j \quad (3.1)$$

durch die kanonischen Vertauschungsrelationen

$$[\hat{q}^i, \hat{q}^j]_- = [\hat{p}_i, \hat{p}_j]_- = 0, \quad [\hat{q}^i, \hat{p}_j]_- = i\hbar \delta^i_j \quad (3.2)$$

zu ersetzen. Diese Quantisierungsvorschrift ermöglicht es, zu jeder klassischen Observablen  $O^{(i)} = O^{(i)}(q^i; p_i)$  einen quantenmechanischen Operator  $\hat{O}^{(i)} = O^{(i)}(\hat{q}^i; \hat{p}_i)$  zu konstruieren. Im allgemeinen ist die Zuordnung allerdings mehrdeutig. Während bei klassischen Observablen  $O^{(i)} = O^{(i)}(q^i; p_i)$  die Reihenfolge der Orts- und Impulskoordinaten keine Rolle spielt, kann die Anordnung der Orts- und Impulsoperatoren bei einem quantenmechanischen Operator  $\hat{O}^{(i)} = O^{(i)}(\hat{q}^i; \hat{p}_i)$  aufgrund der kanonischen Vertauschungsrelationen (3.2) entscheidend sein.

Als Beispiel soll eine klassische Punktmasse  $m$  betrachtet werden, die sich auf einer  $D$ -dimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit mit der Metrik  $g^{(i)ij}(q)$  unter dem Einfluß des skalaren Potentials  $V^{(i)}(q)$  und des Vektorpotentials  $A_i^{(i)}(q)$  bewegt. Nach

der obigen Quantisierungsvorschrift kann man der klassischen Hamilton-Funktion  $H^{(i)} = H^{(i)}(q^i; p_i)$  in (2.53) sowohl

$$\hat{H}_1^{(i)} = \frac{1}{2m} g^{(i)ij}(\hat{q}) \left( \hat{p}_i - A_i^{(i)}(\hat{q}) \right) \left( \hat{p}_j - A_j^{(i)}(\hat{q}) \right) + V^{(i)}(\hat{q}) \quad (3.3)$$

als auch

$$\hat{H}_2^{(i)} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p}_i - A_i^{(i)}(\hat{q}) \right) g^{(i)ij}(\hat{q}) \left( \hat{p}_j - A_j^{(i)}(\hat{q}) \right) + V^{(i)}(\hat{q}) \quad (3.4)$$

als entsprechenden Hamilton-Operator zuordnen. Aufgrund der kanonischen Vertauschungsrelationen (3.2) sind aber beide Operatoren  $\hat{H}_1^{(i)}$  und  $\hat{H}_2^{(i)}$  voneinander verschieden.

Das Operatorordnungsproblem, das bei der Quantisierung klassischer Systeme auftreten kann, ist von grundsätzlicher Natur und läßt sich im allgemeinen nicht a priori lösen. Letztendlich kann nur das Experiment entscheiden, welcher Operator  $\hat{O}^{(i)} = O^{(i)}(\hat{q}^i; \hat{p}_i)$  tatsächlich einer klassischen Observablen  $O^{(i)} = O^{(i)}(q^i; p_i)$  entspricht. Im Falle einer Punktmasse  $m$ , die sich auf einer  $D$ -dimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit unter dem Einfluß äußerer Potentiale bewegt, ist es allerdings möglich, das von der Metrik hervorgerufene Operatorordnungsproblem durch zusätzliche Annahmen zu lösen. Analog zur Vorgehensweise in der Allgemeinen Relativitätstheorie [42, S. 113], [70, S. 158], [129, S. 91] liegt es nahe, zu fordern, daß ein quantenmechanischer Operator

- unter unitären integrablen Transformationen der Ortsoperatoren forminvariant ist (Kovarianzprinzip),
- im Falle einer euklidischen Metrik die gewöhnliche Form annimmt, bei der kein Operatorordnungsproblem auftritt (Korrespondenzprinzip),
- die einfachst mögliche Gestalt besitzt (Einfachheitsprinzip).

Es zeigt sich, daß der klassischen Hamilton-Funktion  $H^{(i)}(q^i; p_i)$  in (2.53) unter Berücksichtigung dieser drei zusätzlichen Forderungen eindeutig der Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(i)} = & \frac{1}{2m} g^{(i)}(\hat{q})^{-\frac{1}{4}} \left( \hat{p}_i - A_i^{(i)}(\hat{q}) \right) g^{(i)}(\hat{q})^{\frac{1}{4}} g^{(i)ij}(\hat{q}) \\ & \cdot g^{(i)}(\hat{q})^{\frac{1}{4}} \left( \hat{p}_j - A_j^{(i)}(\hat{q}) \right) g^{(i)}(\hat{q})^{-\frac{1}{4}} + V^{(i)}(\hat{q}) \end{aligned} \quad (3.5)$$

zugeordnet werden kann [24, 104], wobei  $g^{(i)}(q)$  die Determinante der kovarianten Metrik  $g_{ij}^{(i)}(q)$  bezeichnet:

$$g^{(i)}(q) = \text{Det} \left\{ g_{ij}^{(i)}(q) \right\} . \quad (3.6)$$

Aufgrund dieses Ergebnisses wird im folgenden der Standpunkt eingenommen, daß der Hamilton-Operator (3.5) das quantenmechanische System einer Punktmasse  $m$  definiert, die sich auf einer  $D$ -dimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit unter dem Einfluß äußerer Felder bewegt.

### 3.1.2 Schrödingersches Anfangswertproblem

Der Zustand eines Systems zum Zeitpunkt  $t$  wird in der Schrödingerschen Quantenmechanik durch einen Zustandsvektor  $|\psi^{(i)}(t)\rangle$  in einem Hilbert-Raum  $\mathcal{H}^{(i)}$  beschrieben. Er genügt der Dynamik eines Schrödingerschen Anfangswertproblems, das durch den Hamilton-Operator  $\hat{H}^{(i)}$  des Systems festgelegt ist:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi^{(i)}(t)\rangle = \hat{H}^{(i)} |\psi^{(i)}(t)\rangle, \quad |\psi^{(i)}(t_0)\rangle = |\psi_0^{(i)}\rangle. \quad (3.7)$$

Die Lösung von (3.7) besagt, daß der gegebene Anfangszustand  $|\psi^{(i)}(t_0)\rangle$  durch einen linearen, unitären Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}^{(i)}(t, t_0)$  in den gesuchten Endzustand  $|\psi^{(i)}(t)\rangle$  abgebildet wird:

$$|\psi^{(i)}(t)\rangle = \hat{U}^{(i)}(t, t_0) |\psi^{(i)}(t_0)\rangle. \quad (3.8)$$

Aufgrund der Beliebigkeit des Anfangszustandes  $|\psi^{(i)}(t_0)\rangle$  genügt auch der Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}^{(i)}(t, t_0)$  einem Anfangswertproblem

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}^{(i)}(t, t_0) = \hat{H}^{(i)} \hat{U}^{(i)}(t, t_0), \quad \hat{U}^{(i)}(t_0, t_0) = \hat{I}, \quad (3.9)$$

wobei  $\hat{I}$  den Einheitsoperator darstellt. Hängt der Hamilton-Operator  $\hat{H}^{(i)}$  wie in (3.5) nicht explizit von der Zeitkoordinate  $t$  ab, dann lautet die Lösung von (3.9)

$$\hat{U}^{(i)}(t, t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(i)}(t - t_0) \right\}, \quad (3.10)$$

so daß der Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}^{(i)}(t, t_0)$  nur von der Differenz der beiden Zeitkoordinaten  $t$  und  $t_0$  abhängt. Darüber hinaus ist noch nicht näher spezifiziert, ob durch  $\hat{U}^{(i)}(t, t_0)$  eine zeitliche Entwicklung in die Zukunft ( $t > t_0$ ) oder in die Vergangenheit ( $t < t_0$ ) beschrieben wird. Deshalb besitzt der Zeitentwicklungsoperator (3.10) die Symmetrie

$$\hat{U}^{(i)}(t, t_0) = \hat{U}^{(i)\dagger}(t_0, t), \quad (3.11)$$

wobei  $\dagger$  den Übergang zum adjungierten Operator bezeichnet. Um die Kausalität bezüglich der Zeitkoordinate  $t$  zu gewährleisten, muß man vom Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}^{(i)}(t, t_0)$  zum kausalen Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}_c^{(i)}(t, t_0) = \Theta(t - t_0) \hat{U}^{(i)}(t, t_0) \quad (3.12)$$

übergehen, wobei  $\Theta(t - t_0)$  die Heaviside-Funktion bezeichnet:

$$\Theta(t - t_0) = \begin{cases} 1; & t > t_0, \\ 0; & t < t_0. \end{cases} \quad (3.13)$$

Aus (3.9), (3.10) und (3.12) läßt sich dann ablesen, daß der kausale Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}_c^{(i)}(t, t_0)$  einer inhomogenen Differentialgleichung genügt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_c^{(i)}(t, t_0) = \hat{H}^{(i)} \hat{U}_c^{(i)}(t, t_0) + i\hbar \delta(t - t_0) \hat{I}, \quad (3.14)$$

die die folgende Lösung besitzt:

$$\hat{U}_c^{(i)}(t, t_0) = \Theta(t - t_0) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(i)}(t - t_0) \right\}. \quad (3.15)$$

### 3.1.3 Definition der Ortsdarstellung

Die Eigenvektoren  $|q\rangle$  der Ortsoperatoren  $\hat{q}^i$  werden durch das Eigenwertproblem

$$\hat{q}^i |q\rangle = q^i |q\rangle \quad (3.16)$$

definiert und bilden im folgenden Sinne ein vollständiges Orthonormalsystem im Hilbert-Raum  $\mathcal{H}^{(i)}$  [18]:

$$\langle q|q'\rangle = \frac{1}{\sqrt{g^{(i)}(q')}} \delta(q - q'), \quad (3.17)$$

$$\int \sqrt{g^{(i)}(q)} |q\rangle \langle q| d^D q = \hat{I}. \quad (3.18)$$

Dabei hat man die Determinante  $g^{(i)}(q)$  der kovarianten Metrik  $g_{ij}^{(i)}(q)$  in die Definitionen der Orthonormalität (3.17) und der Vollständigkeit (3.18) so einbezogen, daß diese manifest kovariant sind. Die Vollständigkeitsrelation (3.18) hat zur Folge, daß man einen beliebigen Zustandsvektor  $|\psi^{(i)}\rangle$  des zugrunde liegenden Hilbert-Raumes  $\mathcal{H}^{(i)}$  nach den Eigenvektoren  $|q\rangle$  der Ortsoperatoren  $\hat{q}^i$  entwickeln kann:

$$|\psi^{(i)}\rangle = \int \sqrt{g^{(i)}(q)} \psi^{(i)}(q) |q\rangle d^D q. \quad (3.19)$$

Die dabei auftretenden Entwicklungskoeffizienten  $\psi^{(i)}(q)$  bezeichnet man als die Ortsdarstellung des Zustandsvektors  $|\psi^{(i)}\rangle$  oder einfach als die Schrödingersche Wellenfunktion:

$$\psi^{(i)}(q) = \langle q|\psi^{(i)}\rangle. \quad (3.20)$$

Entsprechend führt die Orthonormalitätsrelation (3.17) mit der Entwicklung (3.19) zur Ortsdarstellung des Skalarproduktes zwischen zwei Zustandsvektoren  $|\psi_1^{(i)}\rangle$  und  $|\psi_2^{(i)}\rangle$ :

$$\langle \psi_1^{(i)} | \psi_2^{(i)} \rangle = \int \sqrt{g^{(i)}(q)} \psi_1^{(i)*}(q) \psi_2^{(i)}(q) d^D q. \quad (3.21)$$

Die Eigenvektoren  $|p\rangle$  der Impulsoperatoren  $\hat{p}_j$  bilden ebenfalls ein vollständiges Orthonormalsystem und genügen den zu (3.16)–(3.18) analogen Eigenschaften:

$$\hat{p}_j |p\rangle = p_j |p\rangle, \quad (3.22)$$

$$\langle p | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{f^{(i)}(p')}} \delta(p - p'), \quad (3.23)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{f^{(i)}(p)} |p\rangle \langle p| d^D p = \hat{I}. \quad (3.24)$$

Hierbei wurde eine willkürliche Funktion  $f^{(i)}(p)$  eingeführt, mit der sich die Eigenvektoren  $|p\rangle$  geeignet normieren lassen [24], [76, S. 109]. Fordert man, daß die Impulsoperatoren  $\hat{p}_j$  den kanonischen Vertauschungsrelationen (3.2) genügen, und daß sie bezüglich des Skalarproduktes (3.21) hermitesch sind, dann läßt sich die Jordan-Regel für die Ortsdarstellung von Impulsoperatoren in eindeutiger Weise auch auf nichteuklidische Metriken verallgemeinern [18]:

$$\langle q | \hat{p}_j = \frac{\hbar}{i} \left( \partial_j + \frac{\partial_j g^{(i)}(q)}{4 g^{(i)}(q)} \right) \langle q|. \quad (3.25)$$

Formuliert man damit das Eigenwertproblem (3.22) in der Ortsdarstellung, so lauten die gemäß (3.23) orthonormierten Lösungen

$$\langle q | p \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{D}{2}} (g^{(i)}(q) f^{(i)}(p))^{\frac{1}{4}}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} q^j p_j \right\}. \quad (3.26)$$

### 3.1.4 Übergang zur Ortsdarstellung

Nach diesen Vorbereitungen läßt sich die darstellungsfreie Formulierung des Schrödingerschen Anfangswertproblems (3.7) in die Ortsdarstellung überführen. Danach entwickelt sich die Ortsdarstellung  $\psi^{(i)}(q, t) = \langle q | \psi^{(i)}(t) \rangle$  der Zustandsvektoren  $|\psi^{(i)}(t)\rangle$  gemäß

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^{(i)}(q, t) = \hat{H}^{(i)}(q) \psi^{(i)}(q, t), \quad \psi^{(i)}(q_0, t_0) = \psi_0^{(i)}(q_0). \quad (3.27)$$

Die Ortsdarstellung  $\hat{H}^{(i)}(q)$  des Hamilton-Operators (3.5) läßt sich mit Hilfe der verallgemeinerten Jordan-Regel (3.25) bestimmen:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(i)}(q) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta^{(i)} + \frac{i\hbar}{m} g^{(i)ij}(q) A_i^{(i)}(q) \partial_j + \frac{1}{2m} g^{(i)ij}(q) A_i^{(i)}(q) A_j^{(i)}(q) \\ &+ \frac{i\hbar}{2m} \frac{1}{\sqrt{g^{(i)}(q)}} \partial_i \left\{ \sqrt{g^{(i)}(q)} g^{(i)ij}(q) A_j^{(i)}(q) \right\} + V^{(i)}(q). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Hierbei bezeichnet  $\Delta^{(i)}$  den Laplace-Beltrami-Operator

$$\Delta^{(i)} = g^{(i)ij}(q) \partial_i \partial_j - \Gamma_i^{(i)ij}(q) \partial_j \quad (3.29)$$

und die Kontraktion des Christoffel-Symbols

$$\Gamma_i^{(i)ij}(q) = g^{(i)ik}(q) g^{(i)jl}(q) \Gamma_{ikl}^{(i)}(q) \quad (3.30)$$

ist gemäß der Definition (2.3) durch die Metrik  $g^{(i)ij}(q)$  festgelegt:

$$\Gamma_i^{(i)ij}(q) = -\partial_i g^{(i)ij}(q) - \frac{\partial_i g^{(i)}(q)}{2g^{(i)}(q)} g^{(i)ij}(q). \quad (3.31)$$

Entsprechend ergibt sich die Ortsdarstellung der darstellungsfreien Lösung (3.8) des Schrödingerschen Anfangswertproblems (3.7) zu:

$$\psi^{(i)}(q, t) = \int \sqrt{g^{(i)}(q_0)} G^{(i)}(q, t; q_0, t_0) \psi^{(i)}(q_0, t_0) d^D q_0, \quad (3.32)$$

$$G^{(i)}(q, t; q_0, t_0) = \langle q | \hat{U}^{(i)}(t, t_0) | q_0 \rangle. \quad (3.33)$$

Die Linearität des Schrödingerschen Anfangswertproblems (3.7) spiegelt sich in der Ortsdarstellung (3.32) von deren Lösung wider. Die Ortsdarstellung  $\psi^{(i)}(q_0, t_0)$  des Anfangszustandes  $|\psi^{(i)}(t_0)\rangle$  wird durch einen linearen Integraloperator auf die Ortsdarstellung  $\psi^{(i)}(q, t)$  des Endzustandes  $|\psi^{(i)}(t)\rangle$  abgebildet. Der dabei auftretende Integralkern (3.33) legt die zeitliche Weiterentwicklung quantenmechanischer Zustände fest und wird deshalb als Propagator bezeichnet. Um die Kausalität dieser zeitlichen Weiterentwicklung zu gewährleisten, kann man noch analog zu (3.33) den kausalen Propagator  $G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0)$  als Matrixelement des kausalen Zeitentwicklungsoperators  $\hat{U}_c^{(i)}(t, t_0)$  bezüglich der Eigenvektoren  $|q\rangle$  der Ortsoperatoren  $\hat{q}^i$  einführen:

$$G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0) = \langle q | \hat{U}_c^{(i)}(t, t_0) | q_0 \rangle. \quad (3.34)$$

Geht man in (3.14) zur Ortsdarstellung über, so erhält man für den kausalen Propagator  $G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0)$  eine inhomogene partielle Differentialgleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0) = \hat{H}^{(i)}(q) G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0) + \frac{i\hbar}{\sqrt{g^{(i)}(q_0)}} \delta(t-t_0) \delta(q-q_0). \quad (3.35)$$



### 3.1.5 Transformation der Raumkoordinaten

Bei der Quantisierung des klassischen Systems einer Punktmasse  $m$ , die sich auf einer  $D$ -dimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit unter dem Einfluß äußerer Felder bewegt, ist das Kovarianzprinzip von grundlegender Bedeutung (vgl. Abschnitt 3.1.1). Deshalb ist zu erwarten, daß die durch (3.28), (3.29), (3.31) und (3.35) definierte Bewegungsgleichung des kausalen Propagators  $G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0)$  unter integrierbaren Koordinatentransformationen forminvariant ist. Führt man einen Wechsel der krummlinigen Raumkoordinaten gemäß (1.19) im einzelnen durch, so transformiert sich der kausale Propagator bezüglich beider räumlicher Argumente wie ein Tensor nullter Stufe

$$G_c^{(1)}(Q, t; Q_0, t_0) = G_c^{(i)}(q(Q), t; q(Q_0), t_0) \quad (3.36)$$

und dessen transformierte Bewegungsgleichung lautet

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_c^{(1)}(Q, t; Q_0, t_0) &= \hat{H}^{(1)}(Q) G_c^{(1)}(Q, t; Q_0, t_0) \\ &+ \frac{i\hbar}{\sqrt{g^{(1)}(Q_0)}} \delta(t - t_0) \delta(Q - Q_0). \end{aligned} \quad (3.37)$$

Der Hamilton-Operator erweist sich wie erwartet als forminvariant:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(1)}(Q) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ g^{(1)\lambda\mu}(Q) \partial_\lambda \partial_\mu - \Gamma_\lambda^{(1)\lambda\mu}(Q) \partial_\mu \right\} \\ &+ \frac{i\hbar}{m} g^{(1)\lambda\mu}(Q) A_\lambda^{(1)}(Q) \partial_\mu + \frac{1}{2m} g^{(1)\lambda\mu}(Q) A_\lambda^{(1)}(Q) A_\mu^{(1)}(Q) \\ &+ \frac{i\hbar}{2m} \frac{1}{\sqrt{g^{(1)}(Q)}} \partial_\lambda \left\{ \sqrt{g^{(1)}(Q)} g^{(1)\lambda\mu}(Q) A_\mu^{(1)}(Q) \right\} + V^{(1)}(Q). \end{aligned} \quad (3.38)$$

Das skalare Potential, das Vektorpotential und die Metrik transformieren sich wie in der klassischen Mechanik als ein Tensor nullter, erster und zweiter Stufe (vgl. Abschnitt 2.1.2):

$$V^{(1)}(Q) = V^{(i)}(q(Q)), \quad (3.39)$$

$$A_\lambda^{(1)}(Q) = e_\lambda^i(Q) A_i^{(i)}(q(Q)), \quad (3.40)$$

$$g^{(1)\lambda\mu}(Q) = e_i^\lambda(Q) e_j^\mu(Q) g^{(i)ij}(q(Q)). \quad (3.41)$$

Demgegenüber weicht das Transformationsverhalten der Kontraktion des Christoffel-Symbols von dem eines Tensors erster Stufe ab:

$$\Gamma_\lambda^{(1)\lambda\mu}(Q) = e_j^\mu(Q) \Gamma_i^{(i)ij}(q(Q)) - e_i^\lambda(Q) \partial_\lambda e_j^\mu(Q) g^{(i)ij}(q(Q)). \quad (3.42)$$

Dabei sind die Ergebnisse (3.41) und (3.42) mit einem zu (3.31) analogen Zusammenhang zwischen der transformierten Kontraktion  $\Gamma_\lambda^{(1)\lambda\mu}(Q)$  und der transformierten Metrik  $g^{(1)\lambda\mu}(Q)$  konsistent, wenn man die Integrabilitätseigenschaft (1.18) der Koordinatentransformation (1.19) beachtet.

### 3.1.6 Transformation der Zeitkoordinate

Die Bewegungsgleichung des kausalen Propagators ist aber nicht nur unter den integrierbaren Raumtransformationen (1.19) sondern auch unter den nichtintegrierbaren Zeittransformationen (1.20) forminvariant. Um dies einzusehen, kann man in Anlehnung an die Arbeiten [100, 101] wie folgt schrittweise vorgehen. Zunächst wird der kausale Propagator  $G_c^{(1)}(Q, t; Q_0, t_0)$  einer Fouriertransformation bezüglich der Zeit unterzogen. Dabei wird berücksichtigt, daß der kausale Propagator  $G_c^{(1)}(Q, t; Q_0, t_0)$  nur von der Differenz der Zeitkoordinaten  $t$  und  $t_0$  abhängen kann, da das betrachtete quantenmechanische System abgeschlossen ist:

$$G_c^{(1)}(Q, t; Q_0, t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} G_c^{(1)}(Q, Q_0; E^{(i)}) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E^{(i)}(t - t_0)\right\} \frac{dE^{(i)}}{2\pi\hbar}. \quad (3.43)$$

Aus (3.37), (3.38) und (3.43) gewinnt man dann eine Bewegungsgleichung für die kausale Greensche Funktion  $G_c^{(1)}(Q, Q_0; E^{(i)})$ , die sich im Hinblick auf die nichtintegrierbare Zeittransformation (1.20) mit der Funktion  $f(Q)$  durchmultiplizieren läßt. Um nun die Standardform der Bewegungsgleichung zu reproduzieren, kann man die kausale Greensche Funktion  $G_c^{(1)}(Q, Q_0; E^{(i)})$  mit einer anderen kausalen Greenschen Funktion  $G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, Q_0; E^{(f)})$  beim Energieparameter  $E^{(f)} = 0$  identifizieren:

$$G_c^{(1)}(Q, Q_0; E^{(i)}) = f(Q_0) G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, Q_0; 0). \quad (3.44)$$

Die kausale Greensche Funktion  $G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, Q_0; E^{(f)})$  läßt sich dabei als die Fouriertransformierte eines kausalen Propagators  $G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0)$  bezüglich der Zeitkoordinate  $s$  auffassen:

$$G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, Q_0; E^{(f)}) = \int_0^{+\infty} G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0) \exp\left\{+\frac{i}{\hbar} E^{(f)} s\right\} ds. \quad (3.45)$$

Aufgrund der Bewegungsgleichung dieses kausalen Propagators  $G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ f(Q) g^{(1)\lambda\mu}(Q) \partial_\lambda \partial_\mu - f(Q) \Gamma_\lambda^{(1)\lambda\mu}(Q) \partial_\mu \right] \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{i\hbar}{m} f(Q) g^{(1)\lambda\mu}(Q) A_\lambda^{(1)}(Q) \partial_\mu + \frac{i\hbar}{2m} \frac{f(Q)}{\sqrt{g^{(1)}(Q)}} \partial_\lambda \left[ \sqrt{g^{(1)}(Q)} g^{(1)\lambda\mu}(Q) A_\mu^{(1)}(Q) \right] \\
& + \frac{f(Q)}{2m} g^{(1)\lambda\mu}(Q) A_\lambda^{(1)}(Q) A_\mu^{(1)}(Q) + f(Q) \left[ V^{(1)}(Q) - E^{(i)} \right] \left. \vphantom{\frac{i\hbar}{m}} \right\} G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0) \\
& + \frac{i\hbar}{\sqrt{g^{(1)}(Q_0)}} \delta(s) \delta(Q - Q_0) \tag{3.46}
\end{aligned}$$

kann man wie in der klassischen Mechanik (vgl. Abschnitt 2.1.3) davon ausgehen, daß diese Umformungen das Vektorpotential nicht verändern

$$A_\lambda^{(f)}(Q) = A_\lambda^{(1)}(Q) \tag{3.47}$$

und daß die Metrik einer konformen Abbildung [82, S. 493] unterworfen wird:

$$g^{(f)\lambda\mu}(Q) = f(Q) g^{(1)\lambda\mu}(Q). \tag{3.48}$$

Dann transformiert sich die Determinante der kovarianten Metrik gemäß

$$g^{(f)}(Q) = f(Q)^{-D} g^{(1)}(Q) \tag{3.49}$$

und ein zu (3.31) analoger Zusammenhang zwischen der Kontraktion  $\Gamma_\lambda^{(f)\lambda\mu}(Q)$  und der Metrik  $g^{(f)\lambda\mu}(Q)$  ergibt:

$$\Gamma_\lambda^{(f)\lambda\mu}(Q) = f(Q) \Gamma_\lambda^{(1)\lambda\mu}(Q) + \frac{D-2}{2} \frac{\partial_\lambda f(Q)}{f(Q)} g^{(f)\lambda\mu}(Q). \tag{3.50}$$

Damit erhält man für die Bewegungsgleichung des betrachteten kausalen Propagators  $G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0)$  das Ergebnis

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial s} G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0) & = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ g^{(f)\lambda\mu}(Q) \partial_\lambda \partial_\mu + \frac{D-2}{2} \frac{\partial_\lambda f(Q)}{f(Q)} g^{(f)\lambda\mu}(Q) \partial_\mu \right. \right. \\
& - \Gamma_\lambda^{(f)\lambda\mu}(Q) \partial_\mu \left. \right] + \frac{i\hbar}{m} g^{(f)\lambda\mu}(Q) A_\lambda^{(f)}(Q) \partial_\mu + \frac{1}{2m} g^{(f)\lambda\mu}(Q) A_\lambda^{(f)}(Q) A_\mu^{(f)}(Q) \\
& + \frac{i\hbar(D-2)}{4m} g^{(f)\lambda\mu}(Q) \frac{\partial_\lambda f(Q)}{f(Q)} A_\mu^{(f)}(Q) + f(Q) \left[ V^{(1)}(Q) - E^{(i)} \right] \\
& + \frac{i\hbar}{2m} \frac{1}{\sqrt{g^{(f)}(Q)}} \partial_\lambda \left[ \sqrt{g^{(f)}(Q)} g^{(f)\lambda\mu}(Q) A_\mu^{(f)}(Q) \right] \left. \vphantom{\frac{i\hbar}{m}} \right\} G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0) \\
& + \frac{i\hbar f(Q_0)^{-\frac{D}{2}}}{\sqrt{g^{(f)}(Q_0)}} \delta(s) \delta(Q - Q_0), \tag{3.51}
\end{aligned}$$

das in insgesamt drei Termen von der üblichen Standardform abweicht. Deshalb wird zusätzlich eine lineare Transformation des kausalen Propagators gemäß

$$G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0) = f(Q_0)^{-\frac{D}{2}} \frac{F(Q)}{F(Q_0)} G_{c,E^{(i)}}^{(f)}(Q, s; Q_0, 0) \quad (3.52)$$

durchgeführt, wobei  $F(Q)$  eine noch geeignet festzulegende Funktion darstellt. Setzt man (3.52) in (3.51) ein, so ergibt sich die Bewegungsgleichung des kausalen Propagators  $G_{c,E^{(i)}}^{(f)}(Q, s; Q_0, 0)$  zu

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial s} G_{c,E^{(i)}}^{(f)}(Q, s; Q_0, 0) &= \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ g^{(f)\lambda\mu}(Q) \partial_\lambda \partial_\mu - \Gamma_\lambda^{(f)\lambda\mu}(Q) \partial_\mu \right. \right. \\ &+ 2g^{(f)\lambda\mu}(Q) \left( \frac{\partial_\lambda F(Q)}{F(Q)} - \frac{2-D}{4} \frac{\partial_\lambda f(Q)}{f(Q)} \right) \partial_\mu \left. \right] + \frac{i\hbar}{m} g^{(f)\lambda\mu}(Q) A_\lambda^{(f)}(Q) \partial_\mu \\ &+ \frac{1}{2m} g^{(f)\lambda\mu}(Q) A_\lambda^{(f)}(Q) A_\mu^{(f)}(Q) + \frac{i\hbar}{2m} \frac{1}{\sqrt{g^{(f)}(Q)}} \partial_\lambda \left[ \sqrt{g^{(f)}(Q)} g^{(f)\lambda\mu}(Q) A_\mu^{(f)}(Q) \right] \\ &+ \frac{i\hbar}{m} g^{(f)\lambda\mu}(Q) A_\lambda^{(f)}(Q) \left[ \frac{\partial_\mu F(Q)}{F(Q)} - \frac{2-D}{4} \frac{\partial_\mu f(Q)}{f(Q)} \right] + V^{(f)}(Q) \left. \right\} G_{c,E^{(i)}}^{(f)}(Q, s; Q_0, 0) \\ &+ \frac{i\hbar}{\sqrt{g^{(f)}(Q_0)}} \delta(s) \delta(Q - Q_0), \end{aligned} \quad (3.53)$$

und das skalare Potential  $V^{(f)}(Q)$  ist gegeben durch

$$\begin{aligned} V^{(f)}(Q) &= f(Q) \left\{ V^{(1)}(Q) - E^{(i)} \right\} - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ g^{(f)\lambda\mu}(Q) \frac{\partial_\lambda \partial_\mu F(Q)}{F(Q)} \right. \\ &- \left. \left[ \Gamma_\lambda^{(f)\lambda\mu}(Q) + \frac{2-D}{2} \frac{\partial_\lambda f(Q)}{f(Q)} g^{(f)\lambda\mu}(Q) \right] \frac{\partial_\mu F(Q)}{F(Q)} \right\}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Aus (3.53) ist abzulesen, daß für den kausalen Propagator  $G_{c,E^{(i)}}^{(f)}(Q, s; Q_0, 0)$  die Bewegungsgleichung

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial s} G_{c,E^{(i)}}^{(f)}(Q, s; Q_0, 0) &= \hat{H}^{(f)}(Q) G_{c,E^{(i)}}^{(f)}(Q, s; Q_0, 0) \\ &+ \frac{i\hbar}{\sqrt{g^{(f)}(Q_0)}} \delta(s) \delta(Q - Q_0) \end{aligned} \quad (3.55)$$

mit der Standardform des Hamilton-Operators

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(f)}(Q) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ g^{(f)\lambda\mu}(Q) \partial_\lambda \partial_\mu - \Gamma_\lambda^{(f)\lambda\mu}(Q) \partial_\mu \right\} \\ &+ \frac{i\hbar}{m} g^{(f)\lambda\mu}(Q) A_\lambda^{(f)}(Q) \partial_\mu + \frac{1}{2m} g^{(f)\lambda\mu}(Q) A_\lambda^{(f)}(Q) A_\mu^{(f)}(Q) \end{aligned}$$

$$+ \frac{i\hbar}{2m} \frac{1}{\sqrt{g^{(f)}(Q)}} \partial_\lambda \left\{ \sqrt{g^{(f)}(Q)} g^{(f)\lambda\mu}(Q) A_\mu^{(f)}(Q) \right\} + V^{(f)}(Q) \quad (3.56)$$

resultiert, wenn man die Funktion  $F(Q)$  durch die Bedingung

$$\frac{\partial_\lambda F(Q)}{F(Q)} = \frac{2-D}{4} \frac{\partial_\lambda f(Q)}{f(Q)} \quad (3.57)$$

festlegt. Die Integration von (3.57) ergibt dann

$$F(Q) = f(Q)^{\frac{2-D}{4}}, \quad (3.58)$$

so daß sich die Transformation (3.54) des skalaren Potentials auf

$$\begin{aligned} V^{(f)}(Q) = & f(Q) \left\{ V^{(1)}(Q) - E^{(i)} \right\} + \frac{\hbar^2}{m} \left\{ \frac{2-D}{8} \Gamma_\lambda^{(f)\lambda\mu}(Q) \frac{\partial_\mu f(Q)}{f(Q)} \right. \\ & \left. + g^{(f)\lambda\mu}(Q) \left[ \frac{(D-2)(D-6)}{32} \frac{\partial_\lambda f(Q) \partial_\mu f(Q)}{f(Q)^2} + \frac{D-2}{8} \frac{\partial_\lambda \partial_\mu f(Q)}{f(Q)} \right] \right\} \quad (3.59) \end{aligned}$$

reduziert. Aus (3.43)–(3.45), (3.52) und (3.58) ergibt sich ferner insgesamt die folgende Transformationsvorschrift für den kausalen Propagator:

$$\begin{aligned} G_c^{(1)}(Q, t; Q_0, t_0) = & [f(Q) f(Q_0)]^{\frac{2-D}{4}} \int_0^{+\infty} ds \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE^{(i)}}{2\pi\hbar} \\ & \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E^{(i)} (t - t_0) \right\} G_{c, E^{(i)}}^{(f)}(Q, s; Q_0, 0). \quad (3.60) \end{aligned}$$

## 3.2 Feynmansche Quantenmechanik

Ausgehend von der Schrödingerschen Quantenmechanik wird sukzessive die Feynmansche Quantenmechanik entwickelt, bei der sich der Propagator durch ein Pfadintegral darstellen läßt. Anschließend wird bewiesen, daß beide Formulierungen der Quantenmechanik mathematisch äquivalent sind. Dabei werden einige nützliche Rechenmethoden für Pfadintegrale vorgestellt, mit denen dann die Forminvarianz der Feynmanschen Quantenmechanik unter den nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen (1.19), (1.20) gezeigt werden kann.

### 3.2.1 Pfadintegraldarstellung des Propagators

Bei der Feynmanschen Umformulierung der Schrödingerschen Quantenmechanik geht man von der Definition (3.33) des Propagators als Ortsdarstellung des Zeitentwicklungsoperators (3.10) aus:

$$G^{(i)}(q, t; q_0, t_0) = \langle q | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(i)}(t - t_0) \right\} | q_0 \rangle. \quad (3.61)$$

In einem ersten Schritt wird das vorgegebene Zeitintervall  $[t_0, t]$  in  $N$  äquidistante Teilintervalle  $[t_n, t_{n+1}]$  für  $n = 0, \dots, N - 1$  mit der Breite

$$\epsilon = \frac{t - t_0}{N} \quad (3.62)$$

zerlegt, wobei die Identifikationen  $t_{n=0} = t_0$  und  $t_{n=N} = t$  vorgenommen werden. Diese Intervallzerlegung ermöglicht es, den Exponentialoperator in (3.61) in  $N$  identische Faktoren aufzuspalten:

$$G^{(i)}(q, t; q_0, t_0) = \langle q | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(i)} \epsilon \right\} \cdot \dots \cdot \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(i)} \epsilon \right\} | q_0 \rangle. \quad (3.63)$$

Schiebt man in jeden der  $N - 1$  Zwischenräume zwischen den  $N$  Exponentialoperatoren eine Vollständigkeitsrelation (3.18) ein und berücksichtigt man erneut (3.61), so erhält man das Ergebnis

$$G^{(i)}(q, t; q_0, t_0) = \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int d^D q_n \sqrt{g^{(i)}(q_n)} \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} G^{(i)}(q_{n+1}, \epsilon; q_n, 0) \right\}. \quad (3.64)$$

Demnach ergibt sich die Propagation eines quantenmechanischen Teilchens vom Raum-Zeit-Punkt  $(q_0, t_0)$  zum Raum-Zeit-Punkt  $(q, t)$  durch Summation über die Propagationen entlang aller diskreten Wege

$$(q_0, t_0) \rightarrow (q_1, t_1) \rightarrow \dots \rightarrow (q_{N-1}, t_{N-1}) \rightarrow (q_N, t_N) = (q, t), \quad (3.65)$$

die bei der äquidistanten Zerlegung des Zeitintervalles  $[t_0, t]$  möglich sind (vgl. Abbildung 3.1). In einem zweiten Schritt wird dann das Zeitintervall  $[t_0, t]$  immer feiner zerlegt, indem der Grenzübergang  $N \rightarrow \infty$  durchgeführt wird. Nach (3.62) hat dies zur Folge, daß die Intervallbreite  $\epsilon \rightarrow 0$  geht, wobei aber die endliche Länge  $t - t_0 = \epsilon N$  des vorgegebenen Zeitintervalles  $[t_0, t]$  festgehalten wird. Dieser in  $\epsilon$  und  $N$  gekoppelte Grenzwertprozeß wird mit

$$\lim_{\epsilon} \bullet = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty \\ \epsilon N = t - t_0}} \bullet \quad (3.66)$$

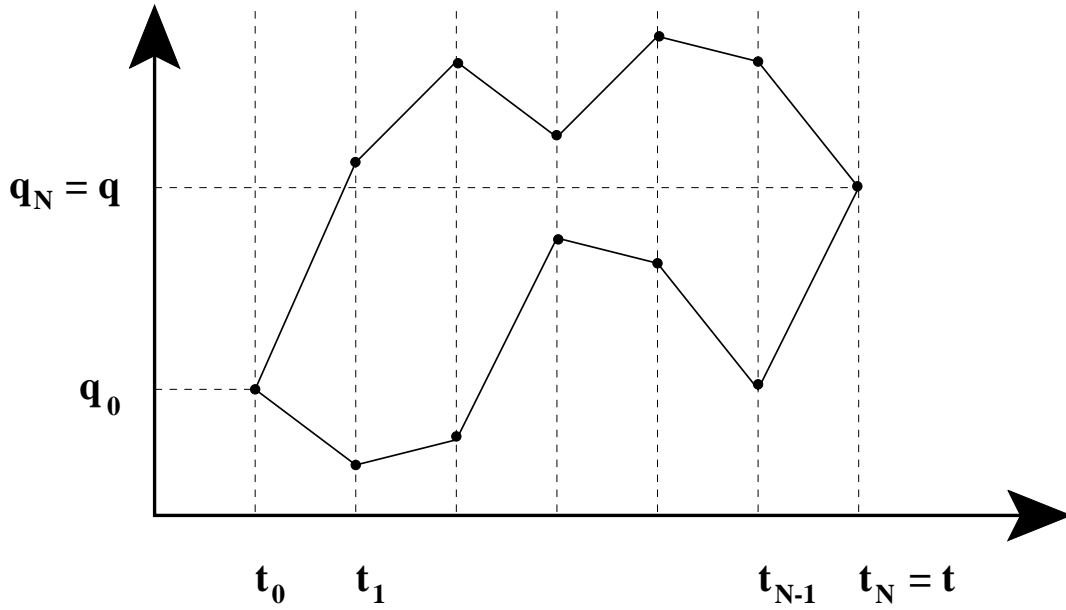


Abbildung 3.1: Zwei verschiedene diskrete Wege, auf denen sich ein quantenmechanisches Teilchen vom Raum-Zeit-Punkt  $(q_0, t_0)$  zum Raum-Zeit-Punkt  $(q, t)$  bewegt.

abgekürzt und auf (3.64) angewendet:

$$G^{(i)}(q, t; q_0, t_0) = \lim_{\epsilon} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int d^D q_n \sqrt{g^{(i)}(q_n)} \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} G^{(i)}(q_{n+1}, \epsilon; q_n, 0) \right\}. \quad (3.67)$$

Durch diesen Grenzwertprozeß resultiert die Propagation eines quantenmechanischen Teilchens vom Raum-Zeit-Punkt  $(q_0, t_0)$  zum Raum-Zeit-Punkt  $(q, t)$  durch Integration über die Propagationen entlang aller kontinuierlichen Wege

$$(q(\tau), \tau), \quad \tau \in [t_0, t], \quad (3.68)$$

die den Einschränkungen  $q(t_0) = q_0$  und  $q(t) = q$  genügen. Deshalb bezeichnet man (3.67) als die Weg- bzw. die Pfadintegraldarstellung des Propagators  $G^{(i)}(q, t; q_0, t_0)$ . Die praktische Bedeutung von (3.67) besteht darin, daß die Berechnung des Propagators  $G^{(i)}(q, t; q_0, t_0)$  auf die des Kurzzeitpropagators  $G^{(i)}(q_{n+1}, \epsilon; q_n, 0)$  zurückgeführt wird. Die Bestimmung des Kurzzeitpropagators kann dabei mit Hilfe des folgenden Satzes erfolgen [82, S. 432].

#### Satz über Kurzzeitpropagatoren:

Alle Kurzzeitpropagatoren  $G^{(i)}(q_{n+1}, \epsilon; q_n, 0)$ , die bis zur ersten Ordnung in  $\epsilon$  übereinstimmen, liefern durch den Grenzübergang  $\epsilon \rightarrow 0$ ,  $N \rightarrow \infty$ ,  $\epsilon N = t - t_0$  im Pfadintegral (3.67) ein- und denselben Propagator  $G^{(i)}(q, t; q_0, t_0)$ .

Mit Hilfe dieses Satzes läßt sich auf der Menge der Kurzzeitpropagatoren eine Äquivalenzrelation einführen. Zwei Kurzzeitpropagatoren  $G_1^{(i)}(q_{n+1}, \epsilon; q_n, 0)$  und  $G_2^{(i)}(q_{n+1}, \epsilon; q_n, 0)$  heißen zueinander äquivalent, kurz

$$G_1^{(i)}(q_{n+1}, \epsilon; q_n, 0) \approx G_2^{(i)}(q_{n+1}, \epsilon; q_n, 0), \quad (3.69)$$

wenn sie bis zur ersten Ordnung in  $\epsilon$  übereinstimmen. Die grundlegende Strategie der Pfadintegrationstheorie beruht dann darauf, aus einer betrachteten Äquivalenzklasse von Kurzzeitpropagatoren einen solchen Repräsentanten auszuwählen, daß die Auswertung des Pfadintegrals (3.67) für den Propagator vereinfacht wird.

### 3.2.2 Berechnung des Kurzzeitpropagators

Im Falle des quantenmechanischen Systems einer Punktmasse  $m$ , die sich auf einer  $D$ -dimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit unter dem Einfluß äußerer Felder bewegt, erhält man den Kurzzeitpropagator nach (3.61) durch Auswertung der Matrixelemente

$$G^{(i)}(q_{n+1}, \epsilon; q_n, 0) = \langle q_{n+1} | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(i)} \epsilon \right\} | q_n \rangle, \quad (3.70)$$

wobei der Hamilton-Operator  $\hat{H}^{(i)}$  durch (3.5) gegeben ist. Die Anwendung des Satzes über Kurzzeitpropagatoren reduziert dieses Problem auf

$$G^{(i)}(q_{n+1}, \epsilon; q_n, 0) \approx \langle q_{n+1} | 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} \left\{ \frac{1}{2m} g^{(i)}(\hat{q})^{-\frac{1}{4}} \left( \hat{p}_i - A_i^{(i)}(\hat{q}) \right) \cdot g^{(i)}(\hat{q})^{+\frac{1}{4}} g^{(i)ij}(\hat{q}) g^{(i)}(\hat{q})^{+\frac{1}{4}} \left( \hat{p}_j - A_j^{(i)}(\hat{q}) \right) g^{(i)}(\hat{q})^{-\frac{1}{4}} + V^{(i)}(\hat{q}) \right\} | q_n \rangle. \quad (3.71)$$

Schiebt man zwischen die einzelnen Operatoren die Vollständigkeitsrelationen (3.18) und (3.24) ein, dann lassen sich die auftretenden Matrixelemente mit Hilfe der Eigenwertprobleme (3.16) und (3.22) sowie der Ortsdarstellung (3.26) der Impuls-eigenvektoren berechnen. Eine nochmalige Anwendung des Satzes über Kurzzeitpropagatoren führt unter Beachtung von (3.31) auf die Integraldarstellung

$$G^{(i)}(q_{n+1}, \epsilon; q_n, 0) \approx \frac{1}{\sqrt{g^{(i)}(q_n)}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^D p_n}{(2\pi\hbar)^D} \exp \left\{ -\frac{i\epsilon}{2m\hbar} g^{(i)ij}(q_{n+1}) p_{i,n} p_{j,n} \right. \\ \left. + \left[ \frac{i}{\hbar} (q_{n+1}^i - q_n^i) + \frac{i\epsilon}{m\hbar} g^{(i)ij}(q_{n+1}) A_j^{(i)}(q_{n+1}) + \frac{\epsilon}{2m} \Gamma_j^{(i)ji}(q_{n+1}) \right] p_{i,n} \right. \\ \left. - \frac{i\epsilon}{\hbar} V^{(i)}(q_{n+1}) - \frac{i\epsilon}{2m\hbar} g^{(i)ij}(q_{n+1}) A_i^{(i)}(q_{n+1}) A_j^{(i)}(q_{n+1}) \right\}$$



$$+ \frac{\epsilon}{2m} \left[ -\Gamma_i^{(i)ij}(q_{n+1}) A_j^{(i)}(q_{n+1}) + g^{(i)ij}(q_{n+1}) \partial_i A_j^{(i)}(q_{n+1}) \right]. \quad (3.72)$$

Die verbleibenden Impulsintegrale lassen sich gemäß

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\vec{x}^T A \vec{x} + \vec{b}^T \vec{x} \right\} d^D x = \sqrt{\frac{\pi^D}{\text{Det } A}} \exp \left\{ \frac{1}{4} \vec{b}^T A^{-1} \vec{b} \right\} \quad (3.73)$$

auswerten, da das Ergebnis der Gauß-Integrale [50, S. 408] mit reeller symmetrischer Matrix  $A$  auch auf die Fresnel-Integrale [120, S. 181] mit imaginärer symmetrischer Matrix  $A$  übertragbar ist. Der Kurzzeitpropagator ergibt sich damit zu

$$\begin{aligned} G^{(i)}(q_{n+1}, \epsilon; q_n, 0) &\approx \sqrt{\frac{g^{(i)}(q_{n+1})}{g^{(i)}(q_n)}} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{D}{2}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \epsilon} g_{ij}^{(i)}(q_{n+1}) (q_{n+1}^i - q_n^i) \right. \\ &\cdot (q_{n+1}^j - q_n^j) + \left[ \frac{1}{2} g_{ij}^{(i)}(q_{n+1}) \Gamma_k^{(i)kj}(q_{n+1}) + \frac{i}{\hbar} A_i^{(i)}(q_{n+1}) \right] (q_{n+1}^i - q_n^i) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V^{(i)}(q_{n+1}) \\ &\left. - \frac{i\hbar \epsilon}{8m} g_{ij}^{(i)}(q_{n+1}) \Gamma_k^{(i)ki}(q_{n+1}) \Gamma_l^{(i)lj}(q_{n+1}) + \frac{\epsilon}{2m} g^{(i)ij}(q_{n+1}) \partial_i A_j^{(i)}(q_{n+1}) \right\}. \quad (3.74) \end{aligned}$$

Setzt man (3.74) in (3.67) ein, so erhält man für den Propagator das Pfadintegral

$$\begin{aligned} G^{(i)}(q, t; q_0, t_0) &= \sqrt{\frac{g^{(i)}(q)}{g^{(i)}(q_0)}} \lim_{\epsilon} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int d^D q_n \sqrt{g^{(i)}(q_n)} \right\} \\ &\left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{ND}{2}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \mathcal{A}_{\hbar}^{(i)}[q_n^i] \right\}. \quad (3.75) \end{aligned}$$

Da die dabei auftretende komplexe Größe

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\hbar}^{(i)}[q_n^i] &= \epsilon \sum_{n=0}^{N-1} \left\{ \frac{m}{2} g_{ij}^{(i)}(q_{n+1}) \frac{q_{n+1}^i - q_n^i}{\epsilon} \frac{q_{n+1}^j - q_n^j}{\epsilon} - V^{(i)}(q_{n+1}) \right. \\ &+ \left[ A_i^{(i)}(q_{n+1}) - \frac{i\hbar}{2} g_{ij}^{(i)}(q_{n+1}) \Gamma_k^{(i)kj}(q_{n+1}) \right] \frac{q_{n+1}^i - q_n^i}{\epsilon} \\ &\left. - \frac{i\hbar}{2m} g^{(i)ij}(q_{n+1}) \partial_i A_j^{(i)}(q_{n+1}) - \frac{\hbar^2}{8m} g_{ij}^{(i)}(q_{n+1}) \Gamma_k^{(i)ki}(q_{n+1}) \Gamma_l^{(i)lj}(q_{n+1}) \right\} \quad (3.76) \end{aligned}$$

im klassischen Grenzübergang  $\hbar \rightarrow 0$  in die diskretisierte Form der Wirkung (2.22) und (2.23) aus der Lagrangeschen Mechanik übergeht, bezeichnet man (3.75) auch als Lagrangesche Pfadintegral des Propagators. Es fällt ferner auf, daß alle Größen in (3.76) am Nachpunkt  $q_{n+1}$  ausgewertet werden. Deshalb ist bei einer expliziten Berechnung des Lagrangeschen Pfadintegrals (3.75) zu beachten, daß die einzelnen Integrale über  $q_n$  sukzessive von  $n = N - 1$  bis  $n = 1$  durchgeführt werden [82, S. 425]. Die hier verwendete Nachpunkt-Regel bei der Definition des Lagrangeschen Pfadintegrals besitzt gegenüber der Mittelpunkt-Regel [53, S. 10] den Vorteil, daß sie einen direkten Zugang zur zeitlichen Entwicklung der Wellenfunktion erlaubt [82, S. 411]. Dies soll im nächsten Abschnitt näher erläutert werden.

### 3.2.3 Herleitung der Schrödinger-Gleichung

Bisher wurde eingehend diskutiert, wie die Feynmansche Quantenmechanik aus der Schrödingerschen Quantenmechanik hervorgeht. Um den Beweis abzuschließen, daß beide Formulierungen der Quantenmechanik mathematisch äquivalent sind, soll nun der umgekehrte Weg beschritten werden. Hierzu sei das Lagrangesche Pfadintegral (3.67), (3.74) des Propagators  $G^{(i)}(q, t; q_0, t_0)$  vorgegeben, der die Entwicklung (3.32) der Wellenfunktion  $\psi^{(i)}(q, t)$  während der endlichen Zeit  $t - t_0$  beschreibt. Zu zeigen ist dann, daß die entsprechende Bewegungsgleichung der Wellenfunktion  $\psi^{(i)}(q, t)$  mit der Schrödinger-Gleichung (3.27)–(3.29), (3.31) übereinstimmt. Deshalb wird im folgenden die erste Zeitableitung der Wellenfunktion  $\psi^{(i)}(q, t)$  als Grenzwert des Differenzenquotienten bestimmt:

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi^{(i)}(q, t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\psi^{(i)}(q, t + \epsilon) - \psi^{(i)}(q, t)}{\epsilon}. \quad (3.77)$$

Um (3.77) auswerten zu können, muß man die Entwicklung der Wellenfunktion  $\psi^{(i)}(q, t)$  während der infinitesimalen Zeit  $\epsilon$  betrachten, die gemäß (3.32) durch den Kurzzeitpropagator  $G^{(i)}(q, \epsilon; q_0, 0)$  charakterisiert wird:

$$\psi^{(i)}(q, t + \epsilon) = \int \sqrt{g^{(i)}(q_0)} G^{(i)}(q, \epsilon; q_0, 0) \psi^{(i)}(q_0, t) d^D q_0. \quad (3.78)$$

Setzt man (3.74) in (3.78) ein, so hat man das verbleibende Integral wegen des in (3.77) durchzuführenden Grenzwertprozesses  $\epsilon \rightarrow 0$  nur bis zur ersten Ordnung in  $\epsilon$  zu berechnen. Hierzu substituiert man die Integrationsvariablen  $q_0^i$  bei festgehaltenen Nachpunktkoordinaten  $q^i$  gemäß

$$\Delta q^i(q_0) = q^i - q_0^i \quad (3.79)$$

und entwickelt bis auf den Integralkern

$$K(\Delta q) = \sqrt{g^{(i)}(q)} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{D}{2}} \exp \left\{ - \frac{m}{2i \hbar \epsilon} g_{ij}^{(i)}(q) \Delta q^i \Delta q^j \right\} \quad (3.80)$$

alle Terme in eine Potenzreihe nach  $\Delta q^i$  [82, S. 425]. Dabei treten die Erwartungswerte  $\langle F(\Delta q) \rangle$  von Funktionen  $F(\Delta q)$  bezüglich dieses Integralkernes  $K(\Delta q)$  auf:

$$\langle F(\Delta q) \rangle = \int F(\Delta q) K(\Delta q) d^D \Delta q. \quad (3.81)$$

Die Erwartungswerte von Monomen lassen sich beispielsweise sukzessive durch Differentiationen von (3.73) nach den Komponenten des Vektors  $\vec{b}$  bestimmen:

$$\langle 1 \rangle = 1, \quad (3.82)$$

$$\langle \Delta q^i \rangle = 0, \quad (3.83)$$

$$\langle \Delta q^i \Delta q^j \rangle = \frac{i\hbar\epsilon}{m} g^{(i)ij}(q), \quad (3.84)$$

$$\langle \Delta q^i \Delta q^j \Delta q^k \rangle = 0, \quad (3.85)$$

$$\langle \Delta q^i \Delta q^j \Delta q^k \Delta q^l \rangle = \left( \frac{i\hbar\epsilon}{m} \right)^2 g^{(i)ijkl}(q), \quad (3.86)$$

$$\langle \Delta q^i \Delta q^j \Delta q^k \Delta q^l \Delta q^m \rangle = 0, \quad (3.87)$$

$$\langle \Delta q^i \Delta q^j \Delta q^k \Delta q^l \Delta q^m \Delta q^n \rangle = \left( \frac{i\hbar\epsilon}{m} \right)^3 g^{(i)ijklmn}(q), \quad (3.88)$$

wobei die beiden Abkürzungen [82, S. 429]

$$g^{(i)ijkl}(q) = g^{(i)ij}(q)g^{(i)kl}(q) + g^{(i)ik}(q)g^{(i)jl}(q) + g^{(i)il}(q)g^{(i)jk}(q) \quad (3.89)$$

und

$$\begin{aligned} g^{(i)ijklmn}(q) &= g^{(i)ij}(q)g^{(i)klmn}(q) + g^{(i)ik}(q)g^{(i)jlmn}(q) \\ &+ g^{(i)il}(q)g^{(i)jkmn}(q) + g^{(i)im}(q)g^{(i)jklm}(q) + g^{(i)in}(q)g^{(i)jklm}(q) \end{aligned} \quad (3.90)$$

Wick-Entwicklungen entsprechen [82, S. 177]. Aus (3.82)–(3.88) liest man zwei Gesetzmäßigkeiten ab, die bei der Potenzreihenentwicklung nach  $\Delta q^i$  zu beachten sind:

- Die Erwartungswerte von ungeraden Monomen liefern keinen Beitrag.
- Bei geraden Monomen entspricht jeder Faktor  $\Delta q^i$  einem Faktor  $\epsilon^{\frac{1}{2}}$ .

Mit Hilfe dieser beiden Gesetzmäßigkeiten erhält man insgesamt aus (3.74) und (3.78) bis zur ersten Ordnung in  $\epsilon$ :

$$\begin{aligned} \psi^{(i)}(q, t + \epsilon) &= \psi^{(i)}(q, t) \left\{ 1 - \frac{i\epsilon}{8m} g_{ij}^{(i)}(q) \Gamma_k^{(i)ki}(q) \Gamma_l^{(i)lj}(q) \right. \\ &+ \left. \frac{\epsilon}{2m} g^{(i)ij}(q) \partial_i A_j^{(i)}(q) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V^{(i)}(q) \right\} \langle 1 \rangle + \left\{ \frac{1}{2} \partial_i \partial_j \psi^{(i)}(q, t) \right. \\ &- \left[ \frac{1}{2} g_{ik}^{(i)}(q) \Gamma_l^{(i)lk}(q) + \frac{i}{\hbar} A_i^{(i)}(q) \right] \partial_j \psi^{(i)}(q, t) + \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{2} g_{ik}^{(i)}(q) \Gamma_l^{(i)lk}(q) + \frac{i}{\hbar} A_i^{(i)}(q) \right] \\ &\cdot \left. \left[ \frac{1}{2} g_{jm}^{(i)}(q) \Gamma_n^{(i)nm}(q) + \frac{i}{\hbar} A_j^{(i)}(q) \right] \right\} \langle \Delta q^i \Delta q^j \rangle. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Setzt man (3.91) mit den beiden Erwartungswerten (3.82) und (3.84) in (3.77) ein und führt man den Grenzwertprozeß  $\epsilon \rightarrow 0$  durch, so reduziert sich die Bewegungsgleichung der Wellenfunktion  $\psi^{(i)}(q, t)$  wie erwartet auf die Schrödinger-Gleichung (3.27)–(3.29), (3.31).

### 3.2.4 Äquivalente Kurzzeitpropagatoren

Die Überlegungen des vorangegangenen Abschnittes ermöglichen es, den auf Seite 60 eingeführten Begriff einer Äquivalenzklasse von Kurzzeitpropagatoren zu präzisieren. Der Herleitung (3.77), (3.78) der Schrödinger-Gleichung (3.27)–(3.29), (3.31) aus dem Lagrangeschen Pfadintegral (3.67) ist nämlich zu entnehmen, daß letztendlich nur drei Erwartungswerte des Kurzzeitpropagators  $G^{(i)}(q, \epsilon; q_0, 0)$  bis zur ersten Ordnung in  $\epsilon$  relevant sind [82, S. 432]:

$$\int \sqrt{g^{(i)}(q_0)} G^{(i)}(q, \epsilon; q_0, 0) d^D q_0 \approx 1 - \frac{i\epsilon}{2m\hbar} g^{(i)ij}(q) A_i^{(i)}(q) A_j^{(i)}(q) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V^{(i)}(q) + \frac{\epsilon}{2m} \frac{1}{\sqrt{g^{(i)}(q)}} \partial_i \left\{ \sqrt{g^{(i)}(q)} g^{(i)ij}(q) A_j^{(i)}(q) \right\}, \quad (3.92)$$

$$\int \sqrt{g^{(i)}(q_0)} G^{(i)}(q, \epsilon; q_0, 0) \Delta q^i d^D q_0 \approx \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \Gamma_j^{(i)ji}(q) - \frac{\epsilon}{m} g^{(i)ij}(q) A_j^{(i)}(q), \quad (3.93)$$

$$\int \sqrt{g^{(i)}(q_0)} G^{(i)}(q, \epsilon; q_0, 0) \Delta q^i \Delta q^j d^D q_0 \approx \frac{i\hbar\epsilon}{m} g^{(i)ij}(q). \quad (3.94)$$

Hierbei ist zu beachten, daß die Integrationsvariablen  $q_0^i$  bei festgehaltenen Nachpunktkoordinaten  $q^i$  gemäß (3.79) zu substituieren sind. Dieses Ergebnis besagt, daß alle Kurzzeitpropagatoren, die im Grenzübergang  $\epsilon \rightarrow 0$  die Erwartungswerte (3.92)–(3.94) aufweisen, eine Äquivalenzklasse bilden. Aufgrund des Satzes über Kurzzeitpropagatoren kann demnach die Auswertung eines Lagrangeschen Pfadintegrals (3.67) dadurch vereinfacht werden, daß man mit Hilfe der Kriterien (3.92)–(3.94) aus einer vorgegebenen Äquivalenzklasse von Kurzzeitpropagatoren einen geeigneten Repräsentanten, wie zum Beispiel (3.74), auswählt. Diese nützliche Rechenmethode für Pfadintegrale wird in den beiden folgenden Abschnitten angewendet, um die Forminvarianz der Feynmanschen Quantenmechanik unter den integrierbaren Raumtransformationen (1.19) und den nichtintegrierbaren Zeittransformationen (1.20) nachzuweisen.

### 3.2.5 Transformation der Raumkoordinaten

Zunächst wird im Pfadintegral (3.67), (3.74) des kausalen Propagators

$$G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0) = \Theta(t - t_0) G^{(i)}(q, t; q_0, t_0) \quad (3.95)$$

ein Wechsel der krummlinigen Raumkoordinaten gemäß (1.19) vorgenommen. Führt man die Definitionen aus (3.36), (3.39)–(3.42) ein, so besitzt der transformierte

kausale Propagator das Pfadintegral

$$G_c^{(1)}(Q, t; Q_0, t_0) = \Theta(t - t_0) \lim_{\epsilon} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int d^D Q_n \sqrt{g^{(1)}(Q_n)} \right\} \cdot \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} G_c^{(1)}(Q_{n+1}, \epsilon; Q_n, 0) \right\}, \quad (3.96)$$

und der transformierte Kurzzeitpropagator lautet

$$G_c^{(1)}(Q_{n+1}, \epsilon; Q_n, 0) \approx \sqrt{\frac{g^{(1)}(Q_{n+1})}{g^{(1)}(Q_n)}} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{\frac{D}{2}} \frac{J(Q_n)}{J(Q_{n+1})} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \epsilon} g_{\lambda\mu}^{(1)} \right. \\ \cdot e_i^\lambda e_j^\mu \Delta q_n^i \Delta q_n^j + \left[ \frac{1}{2} g_{\lambda\mu}^{(1)} \Gamma_\nu^{(1)\nu\mu} - \frac{1}{2} e_j^\mu \partial_\nu e_\kappa^j g_{\lambda\mu}^{(1)} g^{(1)\nu\kappa} + \frac{i}{\hbar} A_\lambda^{(1)} \right] e_i^\lambda \Delta q_n^i \\ - \frac{i\epsilon}{\hbar} V^{(1)} - \frac{i\hbar\epsilon}{8m} \left[ e_i^\lambda e_j^\mu \partial_\nu e_\kappa^i \partial_\sigma e_\rho^j g_{\lambda\mu}^{(1)} g^{(1)\nu\kappa} g^{(1)\sigma\rho} - 2 e_i^\lambda \partial_\nu e_\kappa^i g_{\lambda\mu}^{(1)} g^{(1)\nu\kappa} \Gamma_\sigma^{(1)\sigma\mu} \right. \\ \left. \left. + g_{\lambda\mu}^{(1)} \Gamma_\nu^{(1)\nu\lambda} \Gamma_\kappa^{(1)\kappa\mu} \right] + \frac{\epsilon}{2m} \left[ g^{(1)\lambda\mu} \partial_\lambda A_\mu^{(1)} - e_i^\nu \partial_\lambda e_\mu^i g^{(1)\lambda\mu} A_\nu^{(1)} \right] \right\}. \quad (3.97)$$

Hierbei werden die redundanten Argumente  $Q_{n+1}$  weggelassen und die beiden Abkürzungen

$$\frac{J(Q_n)}{J(Q_{n+1})} = \frac{\text{Det} \{e_i^\lambda(Q_n)\}}{\text{Det} \{e_i^\lambda(Q_{n+1})\}}, \quad (3.98)$$

$$\Delta q_n^i = q^i(Q_{n+1}) - q^i(Q_n) \quad (3.99)$$

verwendet. Um den Kurzzeitpropagator (3.97) nach dem in Abschnitt 3.2.4 dargestellten Verfahren zu vereinfachen, muß man (3.98) und (3.99) um den Nachpunkt  $Q_{n+1}$  nach Potenzen von

$$\Delta Q_n^\lambda = Q_{n+1}^\lambda - Q_n^\lambda \quad (3.100)$$

entwickeln. Dabei geht aus (3.97) hervor, daß man die Entwicklung von (3.98) bis zur zweiten Ordnung

$$\frac{J(Q_n)}{J(Q_{n+1})} \approx 1 - e_i^\lambda \partial_\mu e_\lambda^i \Delta Q_n^\mu + \frac{1}{2} \left\{ e_i^\lambda e_j^\kappa \partial_\mu e_\lambda^i \partial_\nu e_\kappa^j \right. \\ \left. + \partial_\nu e_i^\lambda \partial_\mu e_\lambda^i + e_i^\lambda \partial_\nu \partial_\mu e_\lambda^i \right\} \Delta Q_n^\mu \Delta Q_n^\nu \quad (3.101)$$

und die von (3.99) bis zur dritten Ordnung

$$\Delta q_n^i \approx e_\mu^i \Delta Q_n^\mu - \frac{1}{2} \partial_\nu e_\mu^i \Delta Q_n^\mu \Delta Q_n^\nu + \frac{1}{6} \partial_\kappa \partial_\nu e_\mu^i \Delta Q_n^\mu \Delta Q_n^\nu \Delta Q_n^\kappa \quad (3.102)$$

vorantreiben muß. Setzt man die Entwicklungen (3.101) und (3.102) in (3.97) ein, dann führt eine langwierige, aber direkt ausführbare Rechnung bis zur ersten Ordnung in  $\epsilon$  zu dem Zwischenergebnis

$$\begin{aligned}
G_c^{(1)}(Q_{n+1}, \epsilon; Q_n, 0) &\approx \sqrt{\frac{g^{(1)}(Q_{n+1})}{g^{(1)}(Q_n)}} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{\frac{D}{2}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar\epsilon} g_{\lambda\mu}^{(1)} \Delta Q_n^\lambda \Delta Q_n^\mu \right\} \left\{ -\frac{m^2}{8\hbar^2\epsilon^2} \right. \\
&\quad \cdot e_i^\rho e_j^\tau \partial_\nu e^i{}_\mu \partial_\rho e^j{}_\sigma g_{\lambda\rho}^{(1)} g_{\kappa\tau}^{(1)} \Delta Q_n^\lambda \Delta Q_n^\mu \Delta Q_n^\nu \Delta Q_n^\kappa \Delta Q_n^\sigma \Delta Q_n^\rho + \frac{im}{2\hbar\epsilon} \left[ \frac{1}{4} e_i^\sigma e_j^\rho \right. \\
&\quad \cdot \partial_\mu e^i{}_\lambda \partial_\kappa e^j{}_\nu g_{\sigma\rho}^{(1)} + \frac{1}{3} e_i^\sigma \partial_\kappa \partial_\nu e^i{}_\mu g_{\lambda\sigma}^{(1)} + \frac{1}{2} e_i^\sigma e_j^\rho \partial_\nu e^i{}_\mu \partial_\rho e^j{}_\tau g_{\lambda\sigma}^{(1)} g_{\kappa\rho}^{(1)} g^{(1)\rho\tau} - \frac{1}{2} e_i^\sigma \partial_\nu e^i{}_\mu \\
&\quad \cdot g_{\lambda\sigma}^{(1)} g_{\kappa\rho}^{(1)} \Gamma_\tau^{(1)\tau\rho} - \frac{i}{\hbar} e_i^\sigma \partial_\nu e^i{}_\mu g_{\lambda\sigma}^{(1)} A_\kappa^{(1)} + e_i^\sigma e_j^\rho \partial_\kappa e^i{}_\sigma \partial_\nu e^j{}_\mu g_{\lambda\rho}^{(1)} \left. \right] \Delta Q_n^\lambda \Delta Q_n^\mu \Delta Q_n^\nu \Delta Q_n^\kappa \\
&\quad - \frac{im}{2\hbar\epsilon} e_i^\kappa \partial_\nu e^i{}_\mu g_{\lambda\kappa}^{(1)} \Delta Q_n^\lambda \Delta Q_n^\mu \Delta Q_n^\nu + \left[ \frac{1}{2} e_i^\nu e_j^\kappa \partial_\lambda e^i{}_\nu \partial_\mu e^j{}_\kappa - \frac{1}{2} e_i^\kappa e_j^\nu \partial_\lambda e^i{}_\nu \partial_\mu e^j{}_\kappa \right. \\
&\quad + \frac{1}{2} e_i^\nu \partial_\mu \partial_\lambda e^i{}_\nu - \frac{1}{4} e_i^\sigma \partial_\mu e^i{}_\lambda g_{\sigma\kappa}^{(1)} \Gamma_\nu^{(1)\nu\kappa} + \frac{1}{8} e_i^\sigma e_j^\rho \partial_\nu e^i{}_\kappa \partial_\tau e^j{}_\rho g_{\lambda\sigma}^{(1)} g_{\mu\rho}^{(1)} g^{(1)\nu\kappa} g^{(1)\tau\rho} \\
&\quad + \frac{1}{4} e_i^\sigma e_j^\rho \partial_\mu e^i{}_\lambda \partial_\nu e^j{}_\kappa g_{\sigma\rho}^{(1)} g^{(1)\nu\kappa} - \frac{i}{2\hbar} e_i^\sigma \partial_\nu e^i{}_\kappa g_{\lambda\sigma}^{(1)} g^{(1)\nu\kappa} A_\mu^{(1)} + \frac{1}{8} g_{\lambda\kappa}^{(1)} g_{\mu\sigma}^{(1)} \Gamma_\nu^{(1)\nu\kappa} \Gamma_\rho^{(1)\rho\sigma} \\
&\quad + \frac{i}{2\hbar} g_{\lambda\kappa}^{(1)} \Gamma_\nu^{(1)\nu\kappa} A_\mu^{(1)} - \frac{1}{4} e_i^\sigma \partial_\nu e^i{}_\kappa g_{\lambda\sigma}^{(1)} g_{\mu\rho}^{(1)} g^{(1)\nu\kappa} \Gamma_\tau^{(1)\tau\rho} - \frac{1}{2} e_i^\sigma \partial_\mu e^i{}_\sigma g_{\lambda\kappa}^{(1)} \Gamma_\nu^{(1)\nu\kappa} \\
&\quad - \frac{i}{2\hbar} e_i^\sigma \partial_\mu e^i{}_\lambda A_\sigma^{(1)} - \frac{1}{2\hbar^2} A_\lambda^{(1)} A_\mu^{(1)} + \frac{1}{2} e_i^\sigma e_j^\rho \partial_\mu e^i{}_\sigma \partial_\nu e^j{}_\kappa g_{\lambda\rho}^{(1)} g^{(1)\nu\kappa} - \frac{i}{\hbar} e_i^\sigma \partial_\mu e^i{}_\sigma A_\lambda^{(1)} \left. \right] \\
&\quad \cdot \Delta Q_n^\lambda \Delta Q_n^\mu + \left[ \frac{1}{2} g_{\lambda\mu}^{(1)} \Gamma_\nu^{(1)\nu\mu} - \frac{1}{2} e_i^\mu \partial_\nu e^i{}_\kappa g_{\lambda\mu}^{(1)} g^{(1)\nu\kappa} - e_i^\mu \partial_\lambda e^i{}_\mu + \frac{i}{\hbar} A_\lambda^{(1)} \right] \Delta Q_n^\lambda \\
&\quad + 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} V^{(1)} - \frac{i\hbar\epsilon}{8m} \left[ e_i^\lambda e_j^\mu \partial_\nu e^i{}_\kappa \partial_\sigma e^j{}_\rho g_{\lambda\mu}^{(1)} g^{(1)\nu\kappa} g^{(1)\sigma\rho} - 2e_i^\lambda \partial_\nu e^i{}_\kappa g_{\lambda\mu}^{(1)} g^{(1)\nu\kappa} \Gamma_\sigma^{(1)\sigma\mu} \right. \\
&\quad \left. + g_{\lambda\mu}^{(1)} \Gamma_\nu^{(1)\nu\lambda} \Gamma_\kappa^{(1)\kappa\mu} \right] + \frac{\epsilon}{2m} \left[ g^{(1)\lambda\mu} \partial_\lambda A_\mu^{(1)} - e_i^\nu \partial_\lambda e^i{}_\mu g^{(1)\lambda\mu} A_\nu^{(1)} \right] \left. \right\}. \quad (3.103)
\end{aligned}$$

Wertet man die relevanten Erwartungswerte (3.92)–(3.94) des Kurzzeitpropagators (3.103) mit Hilfe von (3.80)–(3.90) bis zur ersten Ordnung in  $\epsilon$  aus, so erhält man unter Verwendung der Integrabilitätseigenschaft (1.18) der Koordinatentransformation (1.19) das Ergebnis

$$\begin{aligned}
G_c^{(1)}(Q_{n+1}, \epsilon; Q_n, 0) &\approx \sqrt{\frac{g^{(1)}(Q_{n+1})}{g^{(1)}(Q_n)}} \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{\frac{D}{2}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar\epsilon} g_{\lambda\mu}^{(1)}(Q_{n+1}) \Delta Q_n^\lambda \Delta Q_n^\mu \right. \\
&\quad + \left[ \frac{1}{2} g_{\lambda\mu}^{(1)}(Q_{n+1}) \Gamma_\nu^{(1)\nu\mu}(Q_{n+1}) + \frac{i}{\hbar} A_\lambda^{(1)}(Q_{n+1}) \right] \Delta Q_n^\lambda + \frac{\epsilon}{2m} g^{(1)\lambda\mu}(Q_{n+1}) \partial_\lambda A_\mu^{(1)}(Q_{n+1})
\end{aligned}$$

$$- \frac{i\hbar\epsilon}{8m} g_{\lambda\mu}^{(1)}(Q_{n+1}) \Gamma_{\nu}^{(1)\nu\lambda}(Q_{n+1}) \Gamma_{\kappa}^{(1)\kappa\mu}(Q_{n+1}) - \frac{i\epsilon}{\hbar} V^{(1)}(Q_{n+1}) \left. \right\}. \quad (3.104)$$

Der Vergleich von (3.104) mit (3.74) zeigt, daß damit die Forminvarianz der Feynmanschen Quantenmechanik unter den integrierbaren Raumtransformationen (1.19) bewiesen ist.

### 3.2.6 Transformation der Zeitkoordinate

Um die nichtintegrierbare Zeittransformation (1.20) in der Feynmanschen Quantenmechanik durchführen zu können, sind eine Reihe von Überlegungen notwendig [82, S. 445]. Hierzu geht man analog zu (3.15) und (3.34) davon aus, daß der kausale Propagator

$$G_c^{(1)}(Q, t; Q_0, t_0) = \langle Q | \hat{U}_c^{(1)}(t, t_0) | Q_0 \rangle \quad (3.105)$$

über die Ortsdarstellung des kausalen Zeitentwicklungsoperators

$$\hat{U}_c^{(1)}(t, t_0) = \Theta(t - t_0) \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(1)}(t - t_0) \right\} \quad (3.106)$$

definiert ist. Durch eine Fouriertransformation

$$\hat{U}_c^{(1)}(E^{(i)}) = \int_{t_0}^{+\infty} \hat{U}_c^{(1)}(t, t_0) \exp \left\{ + \frac{i}{\hbar} E^{(i)}(t - t_0) \right\} dt \quad (3.107)$$

dieses kausalen Zeitentwicklungsoperators (3.106) gewinnt man den Resolventenoperator

$$\hat{U}_c^{(1)}(E^{(i)}) = \lim_{\epsilon \downarrow 0} \frac{-i\hbar}{\hat{H}^{(1)} - E^{(i)} - i\epsilon}, \quad (3.108)$$

wobei die positive, reelle Größe  $\epsilon$  die Kausalität bezüglich der Zeitkoordinate  $t$  garantiert. Es seien nun  $\hat{f}_l$  und  $\hat{f}_r$  zwei invertierbare, aber ansonsten beliebige Operatoren. Dann ermöglicht die Operatoridentität

$$(\hat{A} \hat{B})^{-1} = \hat{B}^{-1} \hat{A}^{-1}, \quad (3.109)$$

daß Gleichung (3.108) umgeschrieben werden kann:

$$\hat{U}_c^{(1)}(E^{(i)}) = \hat{f}_r \hat{U}_{c, E^{(i)}}^{(2)}(0) \hat{f}_l. \quad (3.110)$$

Dabei bezeichnet  $\hat{U}_{c, E^{(i)}}^{(2)}(E^{(f)})$  einen neuen Resolventenoperator

$$\hat{U}_{c, E^{(i)}}^{(2)}(E^{(f)}) = \lim_{\eta \downarrow 0} \frac{-i\hbar}{\hat{H}^{(2)} - E^{(f)} - i\eta} \quad (3.111)$$

mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H}^{(2)} = \hat{f}_l \left\{ \hat{H}^{(1)} - E^{(i)} \right\} \hat{f}_r, \quad (3.112)$$

der durch die Fouriertransformation

$$\hat{U}_{c,E^{(i)}}^{(2)}(E^{(f)}) = \int_0^{+\infty} \hat{U}_{c,E^{(i)}}^{(2)}(s, 0) \exp \left\{ + \frac{i}{\hbar} E^{(f)} s \right\} ds \quad (3.113)$$

aus dem kausalen Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}_{c,E^{(i)}}^{(2)}(s, 0) = \Theta(s) \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(2)} s \right\} \quad (3.114)$$

hervorgeht. Aus der Rücktransformation zu (3.107), (3.110) und (3.113) resultiert insgesamt eine Identität für kausale Zeitentwicklungsoperatoren:

$$\hat{U}_c^{(1)}(t, t_0) = \int_0^{+\infty} ds \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE^{(i)}}{2\pi\hbar} \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} E^{(i)} (t - t_0) \right\} \hat{f}_r \hat{U}_{c,E^{(i)}}^{(2)}(s, 0) \hat{f}_l. \quad (3.115)$$

Nun werden  $\hat{f}_l$  und  $\hat{f}_r$  auf invertierbare Funktionen der Ortsoperatoren  $\hat{Q}$  spezialisiert:

$$\hat{f}_l = f_l(\hat{Q}), \quad \hat{f}_r = f_r(\hat{Q}). \quad (3.116)$$

Mit Hilfe der Ortsdarstellungen (3.105) und

$$G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0) = \langle Q | \hat{U}_{c,E^{(i)}}^{(2)}(s, 0) | Q_0 \rangle \quad (3.117)$$

der kausalen Zeitentwicklungsoperatoren  $\hat{U}_c^{(1)}(t, t_0)$  und  $\hat{U}_{c,E^{(i)}}^{(2)}(s, 0)$  folgt dann aus (3.115) und (3.116) eine Identität für kausale Propagatoren

$$G_c^{(1)}(Q, t; Q_0, t_0) = f_r(Q) f_l(Q_0) \int_0^{+\infty} ds \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE^{(i)}}{2\pi\hbar} \cdot \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} E^{(i)} (t - t_0) \right\} G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0). \quad (3.118)$$

Die Pfadintegraldarstellung des kausalen Propagators  $G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0)$  läßt sich analog zu Abschnitt 3.2.1 ableiten. Durch die Zerlegung des Zeitintervalles  $[0, s]$  in  $N$  äquidistante Teilintervalle mit der Breite

$$\eta = \frac{s}{N} \quad (3.119)$$



und durch den Grenzwertprozeß  $N \rightarrow \infty$ ,  $\eta \rightarrow 0$  bei festem  $s = \eta N$  wird die Berechnung des kausalen Propagators  $G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0)$  auf die des Kurzzeitpropagators  $G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q_{n+1}, \eta; Q_n, 0)$  zurückgeführt:

$$G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0) = \Theta(s) \lim_{\eta} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int d^D Q_n \sqrt{g^{(1)}(Q_n)} \right\} \cdot \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q_{n+1}, \eta; Q_n, 0) \right\}. \quad (3.120)$$

Nach (3.112), (3.114), (3.116) und (3.117) erhält man für diesen Kurzzeitpropagator  $G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q_{n+1}, \eta; Q_n, 0)$  die Matrixelemente

$$\langle Q_{n+1} | \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} f_l(\hat{Q}) [\hat{H}^{(1)} - E^{(i)}] f_r(\hat{Q}) \eta \right\} | Q_n \rangle, \quad (3.121)$$

die sich mit dem Satz über Kurzzeitpropagatoren auswerten lassen. Das Resultat

$$G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q_{n+1}, \eta; Q_n, 0) \approx G_c^{(1)}(Q_{n+1}, f_l(Q_{n+1})f_r(Q_n)\eta; Q_n, 0) \cdot \exp \left\{ +\frac{i}{\hbar} f_l(Q_{n+1})f_r(Q_n)\eta E^{(i)} \right\} \quad (3.122)$$

besagt, daß die Kurzzeitpropagatoren  $G_c^{(1)}(Q_{n+1}, \epsilon; Q_n, 0)$  und  $G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q_{n+1}, \eta; Q_n, 0)$  bis auf einen zusätzlichen Phasenfaktor und eine Umrechnung der infinitesimalen Zeiten  $\epsilon$  und  $\eta$

$$\epsilon = f_l(Q_{n+1})f_r(Q_n)\eta \quad (3.123)$$

zueinander äquivalent sind. Im Grenzübergang unendlich vieler Teilintervalle geht diese Differenzgleichung (3.123) im Falle

$$f_r(Q)f_l(Q) = f(Q) \quad (3.124)$$

gerade in die Differentialgleichung (1.20) über, die die Transformation zwischen den beiden Zeitkoordinaten  $t$  und  $s$  definiert. Nimmt man schließlich noch im Sinne der Nachpunkt-Regel eine Vereinfachung vor

$$f_l(Q) = f(Q), \quad f_r(Q) = 1, \quad (3.125)$$

so lautet die Pfadintegraldarstellung des kausalen Propagators  $G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0)$  nach (3.120), (3.122) und (3.125):

$$G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, 0) = \Theta(s) \lim_{\eta} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int d^D Q_n \sqrt{g^{(1)}(Q_n)} \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{g^{(1)}(Q_{n+1})}{g^{(1)}(Q_n)}} \right\}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \left( \frac{m}{2\pi i \hbar f(Q_{n+1}) \eta} \right)^{\frac{D}{2}} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar \eta} \frac{g_{\lambda\mu}^{(1)}(Q_{n+1})}{f(Q_{n+1})} \Delta Q_n^\lambda \Delta Q_n^\mu + \left( \frac{1}{2} g_{\lambda\mu}^{(1)}(Q_{n+1}) \Gamma_\nu^{(1)\nu\mu}(Q_{n+1}) \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \frac{i}{\hbar} A_\lambda^{(1)}(Q_{n+1}) \right) \Delta Q_n^\lambda - \frac{i\hbar \eta}{8m} f(Q_{n+1}) g_{\lambda\mu}^{(1)}(Q_{n+1}) \Gamma_\nu^{(1)\nu\lambda}(Q_{n+1}) \Gamma_\kappa^{(1)\kappa\mu}(Q_{n+1}) \right. \\
& \quad \left. + \frac{\eta f(Q_{n+1})}{2m} g^{(1)\lambda\mu}(Q_{n+1}) \partial_\lambda A_\mu^{(1)}(Q_{n+1}) - \frac{i\eta f(Q_{n+1})}{\hbar} (V^{(1)}(Q_{n+1}) - E^{(i)}) \right] \Bigg\} . \quad (3.126)
\end{aligned}$$

Mit den Definitionen (3.47)–(3.50) erhält man hieraus ein Pfadintegral, das in vier Termen von der üblichen Standardform abweicht:

$$\begin{aligned}
G_{c,E^{(i)}}^{(2)}(Q, s; Q_0, ) &= f(Q_0)^{-\frac{D}{2}} \Theta(s) \lim_\eta \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int d^D Q_n \sqrt{g^{(f)}(Q_n)} \right\} \\
& \cdot \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{g^{(f)}(Q_{n+1})}{g^{(f)}(Q_n)}} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \eta} \right)^{\frac{D}{2}} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar \eta} g_{\lambda\mu}^{(f)}(Q_{n+1}) \Delta Q_n^\lambda \Delta Q_n^\mu \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \left( \frac{1}{2} g_{\lambda\mu}^{(f)}(Q_{n+1}) \Gamma_\nu^{(f)\nu\mu}(Q_{n+1}) + \frac{i}{\hbar} A_\lambda^{(f)}(Q_{n+1}) + \frac{2-D}{4} \frac{\partial_\lambda f(Q_{n+1})}{f(Q_{n+1})} \right) \Delta Q_n^\lambda \right. \right. \\
& \quad \left. \left. - \frac{i\hbar \eta}{8m} g_{\lambda\mu}^{(f)}(Q_{n+1}) \Gamma_\nu^{(f)\nu\lambda}(Q_{n+1}) \Gamma_\kappa^{(f)\kappa\mu}(Q_{n+1}) + \frac{\eta}{2m} g^{(f)\lambda\mu}(Q_{n+1}) \partial_\lambda A_\mu^{(f)}(Q_{n+1}) \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \frac{i\hbar(D-2)\eta}{8m} \Gamma_\lambda^{(f)\lambda\mu}(Q_{n+1}) \frac{\partial_\mu f(Q_{n+1})}{f(Q_{n+1})} - \frac{i\hbar(D-2)^2\eta}{32m} g^{(f)\lambda\mu}(Q_{n+1}) \right. \right. \\
& \quad \left. \left. \cdot \frac{\partial_\lambda f(Q_{n+1}) \partial_\mu f(Q_{n+1})}{f(Q_{n+1})^2} - \frac{i\eta}{\hbar} f(Q_{n+1}) (V^{(1)}(Q_{n+1}) - E^{(i)}) \right] \right\} . \quad (3.127)
\end{aligned}$$

Deshalb soll eine weitere lineare Transformation des kausalen Propagators gemäß (3.52) durchgeführt werden, wobei die Funktion  $F(Q)$  noch geeignet festzulegen ist. Verwendet man die unmittelbar einsichtige Identität

$$\frac{F(Q_0)}{F(Q)} = \prod_{n=0}^{N-1} \frac{F(Q_n)}{F(Q_{n+1})}, \quad (3.128)$$

dann muß man zur Vereinfachung des Pfadintegrales die Größe  $F(Q_n)$  bis zur ersten Ordnung in  $\eta$  um den Nachpunkt  $Q_{n+1}$  entwickeln (vgl. Abschnitt 3.2.3):

$$\frac{F(Q_n)}{F(Q_{n+1})} \approx 1 - \frac{\partial_\lambda F(Q_{n+1})}{F(Q_{n+1})} \Delta Q_n^\lambda + \frac{\partial_\lambda \partial_\mu F(Q_{n+1})}{2F(Q_{n+1})} \Delta Q_n^\lambda \Delta Q_n^\mu. \quad (3.129)$$

Ersetzt man außerdem  $\Delta Q_n^\lambda \Delta Q_n^\mu$  durch einen zu (3.84) analogen Erwartungswert, so erhält man bis zur ersten Ordnung in  $\eta$

$$\frac{F(Q_n)}{F(Q_{n+1})} \approx \exp \left\{ - \frac{\partial_\lambda F(Q_{n+1})}{F(Q_{n+1})} \Delta Q_n^\lambda + \frac{i\hbar \eta}{2m} g^{(f)\lambda\mu}(Q_{n+1}) \right.$$

$$\cdot \left[ \frac{\partial_\lambda \partial_\mu F(Q_{n+1})}{F(Q_{n+1})} - \frac{\partial_\lambda F(Q_{n+1}) \partial_\mu F(Q_{n+1})}{F(Q_{n+1})^2} \right] \}. \quad (3.130)$$

Aus (3.52), (3.127), (3.128) und (3.130) folgt dann das Pfadintegral

$$\begin{aligned} G_{c,E^{(i)}}^{(f)}(Q, s; Q_0, ) &= \Theta(s) \lim_{\eta} \left\{ \prod_{n=1}^{N-1} \int d^D Q_n \sqrt{g^{(f)}(Q_n)} \right\} \left\{ \prod_{n=0}^{N-1} \sqrt{\frac{g^{(f)}(Q_{n+1})}{g^{(f)}(Q_n)}} \right. \\ &\cdot \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \eta} \right)^{\frac{D}{2}} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar \eta} g_{\lambda\mu}^{(f)}(Q_{n+1}) \Delta Q_n^\lambda \Delta Q_n^\mu + \left( \frac{2-D}{4} \frac{\partial_\lambda f(Q_{n+1})}{f(Q_{n+1})} - \frac{\partial_\lambda F(Q_{n+1})}{F(Q_{n+1})} \right. \right. \\ &+ \frac{i}{\hbar} A_\lambda^{(f)}(Q_{n+1}) + \frac{1}{2} g_{\lambda\mu}^{(f)}(Q_{n+1}) \Gamma_\nu^{(f)\nu\mu}(Q_{n+1}) \left. \left. \Delta Q_n^\lambda + \frac{\eta}{2m} g^{(f)\lambda\mu}(Q_{n+1}) \partial_\lambda A_\mu^{(f)}(Q_{n+1}) \right. \right. \\ &\left. \left. - \frac{i\hbar\eta}{8m} g_{\lambda\mu}^{(f)}(Q_{n+1}) \Gamma_\nu^{(f)\nu\lambda}(Q_{n+1}) \Gamma_\kappa^{(f)\kappa\mu}(Q_{n+1}) - \frac{i\eta}{\hbar} V^{(f)}(Q_{n+1}) \right] \right\} \quad (3.131) \end{aligned}$$

mit dem Potential

$$\begin{aligned} V^{(f)}(Q) &= f(Q) \left\{ V^{(1)}(Q) - E^{(i)} \right\} + \frac{\hbar^2}{m} \left\{ g^{(f)\lambda\mu}(Q) \left[ \frac{(D-2)^2}{32} \frac{\partial_\lambda f(Q) \partial_\mu f(Q)}{f(Q)^2} \right. \right. \\ &\left. \left. + \frac{\partial_\lambda F(Q) \partial_\mu F(Q)}{2F(Q)^2} - \frac{\partial_\lambda \partial_\mu F(Q)}{2F(Q)} \right] + \frac{2-D}{8} \Gamma_\lambda^{(f)\lambda\mu}(Q) \frac{\partial_\mu f(Q)}{f(Q)} \right\}. \quad (3.132) \end{aligned}$$

Legt man die Funktion  $F(Q)$  durch (3.57) fest, geht (3.131) in die Standardform eines Lagrangesche Pfadintegrals über und die Transformation des Potentials (3.132) reduziert sich auf (3.59). Außerdem gewinnt man nach (3.52), (3.57), (3.118) und (3.125) das Resultat, daß sich die kausalen Propagatoren gemäß (3.60) transformieren.

### 3.3 Heisenbergsche Quantenmechanik

Im vorliegenden Abschnitt wird die Forminvarianz der Heisenbergschen Quantenmechanik unter den nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen (1.19), (1.20) bewiesen. Um die resultierenden Transformationsvorschriften mit den früheren Ergebnissen in der Schrödingerschen und in der Feynmanschen Quantenmechanik vergleichen zu können, werden nur die Konsequenzen für den Hamilton-Operator und für den kausalen Zeitentwicklungsoperator untersucht. Die entsprechenden Auswirkungen für die Heisenbergschen Operatoren lassen sich bei Bedarf unmittelbar aus der folgenden Einführung in das Heisenbergsche Anfangswertproblem ablesen.

### 3.3.1 Heisenbergsches Anfangswertproblem

In der Schrödingerschen Quantenmechanik wird die dynamische Entwicklung eines physikalischen Systems durch zeitabhängige Zustandsvektoren  $|\psi^{(i)}(t)\rangle$  beschrieben. Außerdem werden den klassischen Observablen  $O^{(i)} = O^{(i)}(q^i; p_i)$ , die nicht explizit von der Zeit abhängen, zeitunabhängige quantenmechanische Operatoren  $\hat{O}^{(i)} = O^{(i)}(\hat{q}^i; \hat{p}_i)$  zugeordnet. In der Heisenbergschen Quantenmechanik wird dagegen genau der umgekehrte Weg beschritten. Die Zustandsvektoren  $|\psi^{(i)}\rangle$  werden als zeitunabhängig angesehen, so daß die gesamte dynamische Entwicklung von zeitabhängigen Operatoren  $\hat{O}^{(i)}(t)$  getragen wird [23]. Die Verbindung zwischen der Schrödingerschen und der Heisenbergschen Quantenmechanik wird durch die Forderung hergestellt, daß die jeweiligen Erwartungswerte von physikalischen Observablen übereinstimmen sollen:

$$\langle \psi^{(i)}(t) | \hat{O}^{(i)} | \psi^{(i)}(t) \rangle = \langle \psi^{(i)} | \hat{O}^{(i)}(t) | \psi^{(i)} \rangle. \quad (3.133)$$

Es ist naheliegend, den Zustandsvektor  $|\psi^{(i)}\rangle$  der Heisenbergschen Quantenmechanik mit dem Anfangszustand  $|\psi^{(i)}(t_0)\rangle$  der Schrödingerschen Quantenmechanik zu identifizieren:

$$|\psi^{(i)}\rangle = |\psi^{(i)}(t_0)\rangle. \quad (3.134)$$

Nach (3.133) und (3.134) führt dann die Zeitentwicklung (3.8) der Schrödingerschen Zustandsvektoren  $|\psi^{(i)}(t)\rangle$  zu einer entsprechenden Zeitentwicklung der Heisenbergschen Operatoren  $\hat{O}^{(i)}(t)$ :

$$\hat{O}^{(i)}(t) = \hat{U}^{(i)\dagger}(t, t_0) \hat{O}^{(i)} \hat{U}^{(i)}(t, t_0). \quad (3.135)$$

Für ein abgeschlossenes System mit dem Hamilton-Operator  $\hat{H}^{(i)}$  ist der unitäre Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}^{(i)}(t, t_0)$  durch (3.10) gegeben, so daß sich (3.135) auf

$$\hat{O}^{(i)}(t) = \exp \left\{ + \frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(i)}(t - t_0) \right\} \hat{O}^{(i)} \exp \left\{ - \frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(i)}(t - t_0) \right\} \quad (3.136)$$

reduziert. Hieraus liest man zum einen ab, daß die Operatoren  $\hat{O}^{(i)}(t)$  dem Heisenbergschen Anfangswertproblem genügen:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{O}^{(i)}(t) = [\hat{O}^{(i)}(t), \hat{H}^{(i)}]_-, \quad \hat{O}^{(i)}(t_0) = \hat{O}^{(i)}. \quad (3.137)$$

Zum anderen gewinnt man durch Verwendung der Baker-Hausdorff-Reihe [91, S. 290] die explizite Reihendarstellung

$$\hat{O}^{(i)}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{i(t-t_0)}{\hbar} \right)^n [\hat{H}^{(i)}, \hat{O}^{(i)}]_-^n, \quad (3.138)$$

bei der der  $n$ -fache Kommutator

$$[\hat{H}^{(i)}, \hat{O}^{(i)}]_-^n = \left[ \hat{H}^{(i)}, \left[ \hat{H}^{(i)}, \left[ \hat{H}^{(i)}, \dots, \hat{O}^{(i)} \right]_- \right]_- \right]_- \dots \quad (3.139)$$

zwischen den Operatoren  $\hat{H}^{(i)} = H^{(i)}(\hat{q}^i, \hat{p}_i)$  und  $\hat{O}^{(i)} = O^{(i)}(\hat{q}^i, \hat{p}_i)$  mit Hilfe der kanonischen Vertauschungsrelationen (3.2) auszuwerten ist.

### 3.3.2 Transformation der Raumkoordinaten

Der integrable Wechsel (1.19) der krummlinigen Raumkoordinaten führt durch Quantisierung unmittelbar zu einer Transformation der Ortsoperatoren:

$$\hat{q}^i = q^i(\hat{Q}). \quad (3.140)$$

Eine entsprechende Transformation der Impulsoperatoren

$$\hat{p}_j = p_j(\hat{Q}; \hat{P}) \quad (3.141)$$

läßt sich so wählen, daß insgesamt eine unitäre Transformation vorliegt. Fordert man nämlich, daß die kanonischen Vertauschungsrelationen (3.2) durch (3.140) und (3.141) nicht verändert werden

$$[\hat{Q}^\lambda, \hat{Q}^\mu]_- = [\hat{P}_\lambda, \hat{P}_\mu]_- = 0, \quad [\hat{Q}^\lambda, \hat{P}_\mu]_- = i\hbar \delta^\lambda_\mu, \quad (3.142)$$

dann reduziert sich der allgemeine Ansatz (3.141) auf eine lineare Transformation zwischen den Impulsoperatoren  $\hat{p}_j$  und  $\hat{P}_\mu$ :

$$\hat{p}_j = e_j^\mu(\hat{Q}) \hat{P}_\mu + F_j(\hat{Q}). \quad (3.143)$$

Da die dabei auftretenden Funktionen  $F_j(\hat{Q})$  nicht näher festgelegt sind, kann man zusätzlich noch fordern, daß die verallgemeinerte Jordan-Regel (3.25) auch für die Ortsdarstellung der neuen Impulsoperatoren  $\hat{P}_\mu$  gelten soll:

$$\langle q(Q) | \hat{P}_\mu = \frac{\hbar}{i} \left( \partial_\mu + \frac{\partial_\mu g^{(1)}(Q)}{4g^{(1)}(Q)} \right) \langle q(Q) |. \quad (3.144)$$

Hierbei transformiert sich die Determinante der kovarianten Metrik gemäß

$$g^{(1)}(Q) = J(Q)^2 g^{(i)}(q(Q)) \quad (3.145)$$

und  $J(Q)$  bezeichnet die Determinante des  $D$ -Beins  $e^i_\lambda(Q)$ :

$$J(Q) = \text{Det} \{ e^i_\lambda(Q) \}. \quad (3.146)$$

Durch (3.25) und (3.143)–(3.146) ist die Transformation der Impulsoperatoren eindeutig festgelegt:

$$\hat{p}_j = e_j^\mu(\hat{Q}) \hat{P}_\mu + i\hbar e_j^\mu(\hat{Q}) \frac{\partial_\mu J(\hat{Q})}{2J(\hat{Q})}. \quad (3.147)$$

Demnach weicht das Transformationsverhalten der Impulsoperatoren wegen des Operatorordnungsproblems von dem eines Tensors erster Stufe ab und geht im Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$  in das klassische Ergebnis (2.55) über. Ersetzt man die Ortsoperatoren  $\hat{q}^i$  und die Impulsoperatoren  $\hat{p}_i$  im ursprünglichen Hamilton-Operator  $\hat{H}^{(i)} = H^{(i)}(\hat{q}^i; \hat{p}_i)$  durch (3.140) und (3.147), so erhält man den transformierten Hamilton-Operator:

$$\hat{H}^{(1)} = H^{(1)}(\hat{Q}^\lambda; \hat{P}_\lambda) = H^{(i)}\left(q^i(\hat{Q}); e_i^\lambda(\hat{Q}) \hat{P}_\lambda + i\hbar e_i^\lambda(\hat{Q}) \frac{\partial_\lambda J(\hat{Q})}{2J(\hat{Q})}\right). \quad (3.148)$$

Im Falle des abgeschlossenen Systems (3.5) zeigt sich mit der Integrabilitätseigenschaft (1.18) der Koordinatentransformation (1.19) und mit den Definitionen (3.39)–(3.41), (3.145), daß diese unitäre Transformation die Form des Hamilton-Operators nicht verändert:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(1)} &= \frac{1}{2m} g^{(1)}(\hat{Q})^{-\frac{1}{4}} \left( \hat{P}_\lambda - A_\lambda^{(1)}(\hat{Q}) \right) g^{(1)}(\hat{Q})^{\frac{1}{4}} g^{(1)\lambda\mu}(\hat{Q}) \\ &\cdot g^{(1)}(\hat{Q})^{\frac{1}{4}} \left( \hat{P}_\mu - A_\mu^{(1)}(\hat{Q}) \right) g^{(1)}(\hat{Q})^{-\frac{1}{4}} + V^{(1)}(\hat{Q}). \end{aligned} \quad (3.149)$$

Außerdem bewirkt (3.148), daß der kausale Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}_c^{(i)}(t, t_0)$  von (3.15) in den entsprechenden kausalen Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}_c^{(1)}(t, t_0) = \Theta(t - t_0) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(1)}(t - t_0) \right\} \quad (3.150)$$

überführt wird. Geht man zur Ortsdarstellung über, so transformieren sich die Eigenvektoren  $|q\rangle$  der Ortsoperatoren  $\hat{q}^i$  gemäß

$$|Q^{(1)}\rangle = |q(Q)\rangle. \quad (3.151)$$

Dann ist gewährleistet, daß das Eigenwertproblem (3.16), die Orthonormalitätsrelation (3.17) und die Vollständigkeitsrelation (3.18) wegen (3.145) forminvariant bleiben:

$$\hat{Q}^\lambda |Q^{(1)}\rangle = Q^\lambda |Q^{(1)}\rangle, \quad (3.152)$$

$$\langle Q^{(1)} | Q'^{(1)} \rangle = \frac{1}{\sqrt{g^{(1)}(Q')}} \delta(Q - Q'), \quad (3.153)$$

$$\int \sqrt{g^{(1)}(Q)} |Q^{(1)}\rangle \langle Q^{(1)}| d^D Q = \hat{I}. \quad (3.154)$$

Aus (3.15), (3.34), (3.148), (3.150)–(3.152) und

$$G_c^{(1)}(Q, t; Q_0, t_0) = \langle Q^{(1)} | \hat{U}_c^{(1)}(t, t_0) | Q^{(1)} \rangle \quad (3.155)$$

folgt schließlich, daß sich der kausale Propagator gemäß (3.36) wie ein Tensor nullter Stufe transformiert.

### 3.3.3 Transformation der Zeitkoordinate

Bei der Einarbeitung der nichtintegrierbaren Zeittransformation (1.20) kann man auf die Überlegungen von Abschnitt 3.2.6 zurückgreifen. In (3.112), (3.115) und (3.116) wurde gezeigt, daß der kausale Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}_c^{(1)}(t, t_0)$  zum Hamilton-Operator  $\hat{H}^{(1)}$  gemäß

$$\begin{aligned} \hat{U}_c^{(1)}(t, t_0) = & \int_0^{+\infty} ds \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE^{(i)}}{2\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E^{(i)} (t - t_0) \right\} \\ & \cdot f_r(\hat{Q}) \hat{U}_{c, E^{(i)}}^{(f)}(s, 0) f_l(\hat{Q}) \end{aligned} \quad (3.156)$$

auf den kausalen Zeitentwicklungsoperator  $\hat{U}_{c, E^{(i)}}^{(f)}(s, 0)$  zum Hamilton-Operator

$$\hat{H}^{(f)} = f_l(\hat{Q}) \left\{ \hat{H}^{(1)} - E^{(i)} \right\} f_r(\hat{Q}) \quad (3.157)$$

reduzierbar ist. Hierbei bezeichnen  $f_l(\hat{Q})$  und  $f_r(\hat{Q})$  zwei geeignet festzulegende Funktionen der Ortsoperatoren  $\hat{Q}$ . Setzt man (3.149) in (3.157) ein und führt man mit (3.47)–(3.49) eine weitere Funktion  $f(\hat{Q})$  ein, so erhält man mit Hilfe der kanonischen Vertauschungsrelationen (3.142):

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(f)} = & \frac{1}{2m} \frac{f_l(\hat{Q}) f_r(\hat{Q})}{f(\hat{Q})} g^{(f)}(\hat{Q})^{-\frac{1}{4}} \left\{ \hat{P}_\lambda - A_\lambda^{(f)}(\hat{Q}) \right\} g^{(f)}(\hat{Q})^{+\frac{1}{4}} g^{(f)\lambda\mu}(\hat{Q}) g^{(f)}(\hat{Q})^{+\frac{1}{4}} \\ & \cdot \left\{ \hat{P}_\mu - A_\mu^{(f)}(\hat{Q}) \right\} g^{(f)}(\hat{Q})^{-\frac{1}{4}} - \frac{i\hbar}{m} \frac{f_l(\hat{Q}) f_r(\hat{Q})}{f(\hat{Q})} g^{(f)}(\hat{Q})^{+\frac{1}{4}} g^{(f)\lambda\mu}(\hat{Q}) \\ & \cdot \left\{ \frac{\partial_\lambda f_r(\hat{Q})}{f_r(\hat{Q})} - \frac{\partial_\lambda f(\hat{Q})}{2f(\hat{Q})} \right\} \left\{ \hat{P}_\mu - A_\mu^{(f)}(\hat{Q}) \right\} g^{(f)}(\hat{Q})^{-\frac{1}{4}} + V^{(f)}(\hat{Q}). \end{aligned} \quad (3.158)$$

Das Potential  $V^{(f)}(\hat{Q})$  ist dabei gegeben durch

$$V^{(f)}(\hat{Q}) = f_l(\hat{Q}) f_r(\hat{Q}) \left\{ V^{(1)}(\hat{Q}) - E^{(i)} \right\} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{f_l(\hat{Q}) f_r(\hat{Q})}{f(\hat{Q})} \left\{ g^{(f)\lambda\mu}(\hat{Q}) \left[ \left( \frac{\partial_\lambda f_r(\hat{Q})}{f_r(\hat{Q})} \right) \right. \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{D-4}{4} \frac{\partial_\lambda f(\hat{Q})}{f(\hat{Q})} \left( \frac{\partial_\mu f_r(\hat{Q})}{f_r(\hat{Q})} - \frac{D}{4} \frac{\partial_\mu f(\hat{Q})}{f(\hat{Q})} \right) + \partial_\lambda \left( \frac{\partial_\mu f_r(\hat{Q})}{f_r(\hat{Q})} - \frac{D}{4} \frac{\partial_\mu f(\hat{Q})}{f(\hat{Q})} \right) \Big] \\
& + \left( \frac{\partial_\mu f_r(\hat{Q})}{f_r(\hat{Q})} - \frac{D}{4} \frac{\partial_\mu f(\hat{Q})}{f(\hat{Q})} \right) \left( \frac{\partial_\lambda g^{(f)}(\hat{Q})}{2g^{(f)}(\hat{Q})} + \partial_\lambda g^{(f)\lambda\mu}(\hat{Q}) \right) \Big\}. \quad (3.159)
\end{aligned}$$

Damit der Hamilton-Operator (3.158) analog zu (3.5) die Standardform

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{(f)} = & \frac{1}{2m} g^{(f)}(\hat{Q})^{-\frac{1}{4}} \left( \hat{P}_\lambda - A_\lambda^{(f)}(\hat{Q}) \right) g^{(f)}(\hat{Q})^{\frac{1}{4}} g^{(f)\lambda\mu}(\hat{Q}) \\
& \cdot g^{(f)}(\hat{Q})^{\frac{1}{4}} \left( \hat{P}_\mu - A_\mu^{(f)}(\hat{Q}) \right) g^{(f)}(\hat{Q})^{-\frac{1}{4}} + V^{(f)}(\hat{Q}) \quad (3.160)
\end{aligned}$$

erhält, müssen die beiden Funktionen  $f_l(\hat{Q})$  und  $f_r(\hat{Q})$  den Bedingungen

$$\frac{\partial_\lambda f_r(\hat{Q})}{f_r(\hat{Q})} = \frac{\partial_\lambda f(\hat{Q})}{2f(\hat{Q})}, \quad (3.161)$$

$$f_l(\hat{Q}) f_r(\hat{Q}) = f(\hat{Q}) \quad (3.162)$$

genügen. Hieraus folgt unmittelbar

$$f_l(\hat{Q}) = f_r(\hat{Q}) = \sqrt{f(\hat{Q})}, \quad (3.163)$$

so daß die Transformation des Potentials (3.159) unter Beachtung von (3.31) das frühere Ergebnis (3.59) reproduziert.

Geht man zur Ortsdarstellung über, so muß man die Eigenvektoren  $|Q^{(1)}\rangle$  der Ortsoperatoren  $\hat{Q}^\lambda$  gemäß

$$|Q\rangle = f(Q)^{\frac{D}{4}} |Q^{(1)}\rangle \quad (3.164)$$

transformieren (vgl. [82, (14.24)] im Falle  $D = 1$ ), damit das Eigenwertproblem (3.152), die Orthonormalitätsrelation (3.153) und die Vollständigkeitsrelation (3.154) wegen (3.48) forminvariant bleiben:

$$\hat{Q}^\lambda |Q\rangle = Q^\lambda |Q\rangle, \quad (3.165)$$

$$\langle Q|Q'\rangle = \frac{1}{\sqrt{g^{(f)}(Q')}} \delta(Q - Q'), \quad (3.166)$$

$$\int \sqrt{g^{(f)}(Q)} |Q\rangle \langle Q| d^D Q = \hat{I}. \quad (3.167)$$

Nach (3.155), (3.163)–(3.165) und der Definition

$$G_{c,E^{(i)}}^{(f)}(Q, s; Q_0, 0) = \langle Q | \hat{U}_{c,E^{(i)}}^{(f)}(s, 0) | Q_0 \rangle \quad (3.168)$$

reduziert sich dann die Identität (3.156) für kausale Zeitentwicklungsoperatoren in der Ortsdarstellung auf die entsprechende Transformationvorschrift (3.60) für kausale Propagatoren.



### 3.4 Zusammenfassung der Ergebnisse

Bisher wurde im vorliegenden Kapitel nachgewiesen, daß die Schrödingersche, die Feynmansche und die Heisenbergsche Formulierung der Quantenmechanik unter den nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen (1.19), (1.20) invariant sind. Die dabei erzielten Ergebnisse werden nun in der Ortsdarstellung zusammengefaßt und mit den entsprechenden klassischen Resultaten des vorangegangenen Kapitels verglichen.

Nach Feynman läßt sich das quantenmechanische System einer Punktmasse  $m$ , die sich auf einer  $D$ -dimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit mit der Metrik  $g^{(i)ij}(q)$  unter dem Einfluß des skalaren Potentials  $V^{(i)}(q)$  und des Vektorpotentials  $A_i^{(i)}(q)$  bewegt, durch den kausalen Propagator  $G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0)$  beschreiben. Gewöhnlicherweise wird diese komplexwertige Übergangswahrscheinlichkeitsamplitude dadurch bestimmt, daß man die Matrixelemente (3.34) explizit auswertet, die inhomogene partielle Differentialgleichung (3.35) löst oder aber das Pfadintegral (3.67), (3.74) berechnet. Die nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen (1.19), (1.20) ermöglichen darüber hinaus eine weitere Lösungsmethode. Mit ihrer Hilfe kann der kausale Propagator  $G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0)$  des ursprünglichen Systems auf den eines anderen Systems abgebildet werden. Der neue kausale Propagator  $G_{c,E^{(i)}}^{(f)}(Q, s; Q_0, 0)$  beschreibt dabei eine Punktmasse  $m$ , die sich auf einer  $D$ -dimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit mit der Metrik  $g^{(f)\lambda\mu}(Q)$  unter dem Einfluß des skalaren Potentials  $V^{(f)}(Q)$  und des Vektorpotentials  $A_\lambda^{(f)}(Q)$  bewegt (vgl. Abbildung 3.2).

Aus (3.40), (3.41), (3.47) und (3.48) ist abzulesen, daß die nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen (1.19), (1.20) zu den folgenden Transformationen der Metrik und des Vektorpotentials führen:

$$g^{(f)\lambda\mu}(Q) = f(Q) e_i^\lambda(Q) e_j^\mu(Q) g^{(i)ij}(q(Q)) , \quad (3.169)$$

$$A_\lambda^{(f)}(Q) = e^i_\lambda(Q) A_i^{(i)}(q(Q)) . \quad (3.170)$$

Sie sind unabhängig vom Planckschen Wirkungsquantum  $\hbar = 2\pi\hbar$  und stimmen mit den klassischen Ergebnissen (2.78) und (2.79) überein. Demgegenüber erhält man aus (3.39) und (3.59) eine Transformationsvorschrift zwischen den skalaren Potentialen  $V^{(i)}(q)$  und  $V^{(f)}(Q)$ , die aus einer nullten und einer zweiten Ordnung

$$\begin{array}{ccc}
\boxed{\begin{array}{c} g^{(i)ij}(q), A_i^{(i)}(q) \\ V^{(i)}(q) \end{array}} & \begin{array}{c} (3.169), (3.170) \\ \implies \\ (3.171) \end{array} & \boxed{\begin{array}{c} g^{(f)\lambda\mu}(Q), A_\lambda^{(f)}(Q) \\ V^{(f)}(Q) \end{array}} \\
\Downarrow & & \Downarrow \\
\boxed{G_\epsilon^{(i)}(q, t; q_0, t_0)} & \begin{array}{c} (3.172) \\ \longleftarrow \end{array} & \boxed{G_{c, E^{(i)}}^{(f)}(Q, s; Q_0, 0)}
\end{array}$$

Abbildung 3.2: Eine nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation führt zu einer Abbildung zwischen zwei Systemen der Quantenmechanik. Dabei transformieren sich die Metrik, die äußeren Felder und der kausale Propagator des einen Systems in die entsprechenden Größen des anderen Systems.

im Planckschen Wirkungsquantum  $\hbar = 2\pi\hbar$  besteht:

$$\begin{aligned}
V^{(f)}(Q) = & f(Q) \left\{ V^{(i)}(q(Q)) - E^{(i)} \right\} + \frac{\hbar^2}{m} \left\{ \frac{2-D}{8} \Gamma_\lambda^{(f)\lambda\mu}(Q) \frac{\partial_\mu f(Q)}{f(Q)} \right. \\
& \left. + g^{(f)\lambda\mu}(Q) \left[ \frac{(D-2)(D-6)}{32} \frac{\partial_\lambda f(Q) \partial_\mu f(Q)}{f(Q)^2} + \frac{D-2}{8} \frac{\partial_\lambda \partial_\mu f(Q)}{f(Q)} \right] \right\}. \quad (3.171)
\end{aligned}$$

Während die nullte Ordnung im Planckschen Wirkungsquantum  $\hbar = 2\pi\hbar$  mit dem klassischen Resultat (2.81) identisch ist, hängt die zweite Ordnung in komplizierter Weise von den differentialgeometrischen Eigenschaften der Riemann-Mannigfaltigkeit wie der Dimension  $D$  oder der Metrik  $g^{(f)\lambda\mu}(Q)$  ab. Im Anhang B wird im Rahmen der Riemann-Cartan-Differentialgeometrie gezeigt, daß dieser Term zweiter Ordnung mit derjenigen Krümmung und Torsion der Raum-Zeit-Struktur identifiziert werden kann, die durch die nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation (1.19) und (1.20) hervorgerufen wird. In (3.171) ist das bemerkenswerte Resultat hervorzuheben, daß die zweite Ordnung im Planckschen Wirkungsquantum  $\hbar = 2\pi\hbar$  im Falle einer zweidimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit verschwindet. Eine physikalische Interpretation dieses Resultates steht allerdings noch aus. Außerdem wird in Abschnitt 4.1 gezeigt, daß (3.171) im Spezialfall einer einzelnen Raumdimension in das bekannte Resultat von Duru und Kleinert [82, Kap. 14] übergeht.

Nach (3.36) und (3.60) beruht die Transformation des kausalen Propagators im wesentlichen auf zwei Integrationen:

$$G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0) = [f(Q(q)) f(Q(q_0))]^{\frac{2-D}{4}} \int_0^{+\infty} ds \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE^{(i)}}{2\pi\hbar} \\ \cdot \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E^{(i)}(t-t_0)\right\} G_{c, E^{(i)}}^{(f)}(Q(q), s; Q(q_0), 0). \quad (3.172)$$

Die erste Integration entspricht einer Aufsummation über alle möglichen Werte der neuen Zeitkoordinate  $s$  und die zweite Integration stellt eine Fouriertransformation bezüglich des Energieparameters  $E^{(i)}$  dar. Die Abhängigkeit des kausalen Propagators  $G_{c, E^{(i)}}^{(f)}(Q, s; Q_0, 0)$  vom Energieparameter  $E^{(i)}$  rührt dabei daher, daß er in die Transformation (3.171) des skalaren Potentials eingeht. Demnach führt eine genauere Untersuchung von (3.171) und (3.172) zu einer Präzisierung der bisherigen Vorstellung, daß die nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen (1.19) und (1.20) das ursprüngliche quantenmechanische System auf ein zweites abbildet. Nach (3.172) wird nämlich das ursprüngliche System im Grunde genommen zu einer ganzen Familie von Systemen in Beziehung gebracht, die nach (3.171) mit unterschiedlichen Werten des Energieparameters  $E^{(i)}$  parametrisiert ist. Im Hinblick auf konkrete Anwendungen wird es deshalb im folgenden Kapitel notwendig sein, die Abhängigkeiten eines skalaren Potentials von Parametern explizit in der Notation zu berücksichtigen.

## **Teil II**

# **Zur Anwendung nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in einer Raumdimension**



*Jeder, der von der Quantentheorie nicht  
schockiert ist, hat sie nicht verstanden.*

N. Bohr (1885 – 1962)

## Kapitel 4

### Ein Beispiel

Im theoretischen Teil der Arbeit wurde ausführlich dargestellt, daß nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen zu Abbildungen zwischen verschiedenen Systemen der klassischen Mechanik oder der Quantenmechanik führen. Sie stellen damit neue Methoden zur Verfügung, mit denen sich sowohl klassische Trajektorien als auch quantenmechanische kausale Propagatoren berechnen lassen. Das Ziel des vorliegenden Kapitels besteht darin, die Anwendbarkeit dieser Methoden anhand eines nichttrivialen eindimensionalen Beispiels zu demonstrieren.

Im Hinblick auf das Beispiel werden zunächst in Abschnitt 4.1 einige Vorbereitungen getroffen. Abschnitt 4.2 stellt dann das konkrete Problem vor, das Morse-Potential durch eine geeignete nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation auf das Potential des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere abzubilden (vgl. Abbildung 4.3). Der klassische Fall wird in Abschnitt 4.3 behandelt, indem explizit gezeigt wird, daß sich die Trajektorien beider Systeme tatsächlich ineinander transformieren lassen. In Abschnitt 4.4 wird schließlich der entsprechende quantenmechanische Fall diskutiert. Dabei stellt sich heraus, daß dieselbe nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation wie in der klassischen Mechanik nun auch in der Quantenmechanik den kausalen Propagator des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere in den des Morse-Potentials transformiert. Anschließend wird anhand des Morse-Potentials demonstriert, wie sich sowohl die diskreten als auch die kontinuierlichen Spektraldaten eines quantenmechanischen Systems aus der Fouriertransformierten des kausalen Propagators, der Greenschen Funktion, rekonstruieren lassen. Dies zeigt exemplarisch, daß die Methode der nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen auch zur Berechnung quantenmechanischer Spektraldaten angewendet werden kann.

## 4.1 Vorbereitungen

Zur Vorbereitung des angekündigten Beispiels werden die bisherigen Ergebnisse nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in der klassischen Mechanik und in der Quantenmechanik in zweierlei Hinsicht modifiziert. Zunächst wird die Notation durch eine Einführung der Potentialparameter erweitert und dann wird eine Spezialisierung auf eine einzelne Raumdimension vorgenommen.

### 4.1.1 Einführung der Potentialparameter

Aus den Zusammenfassungen in den Abschnitten 2.4 und 3.4 geht hervor, daß sich die nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen in der klassischen Mechanik und in der Quantenmechanik grundsätzlich in einem Punkt voneinander unterscheiden. In der klassischen Mechanik führen sie zu einer direkten Abbildung zwischen zwei einzelnen Systemen. Demgegenüber bewirken sie in der Quantenmechanik, daß das ursprüngliche System zu einer ganzen Familie von Systemen in Beziehung gebracht wird, die eine spezielle Parametrisierung des skalaren Potentials aufweist. Um solche Konsequenzen nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen besser studieren zu können, erweist es sich als nützlich, die Notation in der klassischen Mechanik und in der Quantenmechanik zu erweitern. In Anlehnung an die Arbeit [137] wird im folgenden explizit berücksichtigt, daß das Ausgangspotential  $V^{(i)}(q)$  und das Endpotential  $V^{(f)}(Q)$  nicht nur von den Raumkoordinaten  $q^i$  und  $Q^\lambda$ , sondern zusätzlich noch von Parametersätzen  $\lambda^{(i)}$  und  $\lambda^{(f)}$  abhängen, die die jeweilige Potentialform festlegen:

$$V^{(i)}(q) \quad \Longrightarrow \quad V^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) , \quad (4.1)$$

$$V^{(f)}(Q) \quad \Longrightarrow \quad V^{(f)}(Q; \lambda^{(f)}) . \quad (4.2)$$

Dabei hat man zu beachten, daß auch andere Größen des Ausgangssystems und des Endsystems wie das Vektorpotential, die Metrik, die klassische Trajektorie oder der quantenmechanische kausale Propagator von den Parametersätzen  $\lambda^{(i)}$  und  $\lambda^{(f)}$  abhängen können. Bildet man schließlich beide Systeme aufeinander ab, so kann man davon ausgehen, daß nur einer der beiden Parametersätze – beispielsweise  $\lambda^{(i)}$  – in die nichtintegrierte Raum-Zeit-Transformation (1.19) und (1.20) eingeht:

$$q^i = q^i(Q) \quad \Rightarrow \quad q^i = q^i(Q; \lambda^{(i)}) , \quad (4.3)$$

$$\frac{dt}{ds} = f(Q) \quad \Rightarrow \quad \frac{dt}{ds} = f(Q; \lambda^{(i)}) . \quad (4.4)$$

### 4.1.2 Spezialisierung auf eine Raumdimension

Die weiteren Untersuchungen lassen sich dadurch vereinfachen, daß man nur eine einzelne Raumdimension betrachtet. Dann kann man zum einen von den Vektorpotentialen absehen und sich ganz auf die skalaren Potentiale konzentrieren. Zum anderen kann man die Diskussion darauf beschränken, daß die triviale Metrik

$$g^{(i)11} (q; \lambda^{(i)}) = 1 \quad (4.5)$$

durch die nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation (4.3) und (4.4) nicht verändert wird:

$$g^{(f)11} (Q; \lambda^{(f)}) = 1. \quad (4.6)$$

Nach (2.78) und (3.169) hat dies sowohl in der klassischen Mechanik als auch in der Quantenmechanik zur Folge, daß zwischen der integralen Raumtransformation (4.3) und der nichtintegralen Zeittransformation (4.4) eine Bedingung besteht:

$$f (Q; \lambda^{(i)}) = q' (Q; \lambda^{(i)})^2. \quad (4.7)$$

Der Strich ' bezeichnet hierbei die Ableitung nach der neuen Raumkoordinate  $Q$ . Es ist anzumerken, daß die Bedingung (4.7) zur Forminvarianz der Wirkungsvariable unter nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen führt [101]. Dieses Ergebnis erinnert damit sowohl an die klassischen adiabatischen Invarianten von Ehrenfest als auch an deren heuristische Quantisierung durch Planck, Einstein und Bohr [30, 47].

### 4.1.3 Klassische Mechanik

Durch die Einführung der Potentialparameter und durch die Spezialisierung auf eine Raumdimension wird es notwendig, die in Abschnitt 2.4 zusammengefaßten Ergebnisse der nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen in der klassischen Mechanik erneut darzustellen (vgl. Abbildung 4.1). Verwendet man im Unterschied zu Abschnitt 2.4 den Ort  $q_0$  und die Energie  $E^{(i)}$  als Anfangsbedingungen, so transformieren sich diese nach (2.20) und (4.3):

$$Q_0 = Q (q_0; \lambda^{(i)}), \quad (4.8)$$

$$E^{(f)} = 0. \quad (4.9)$$



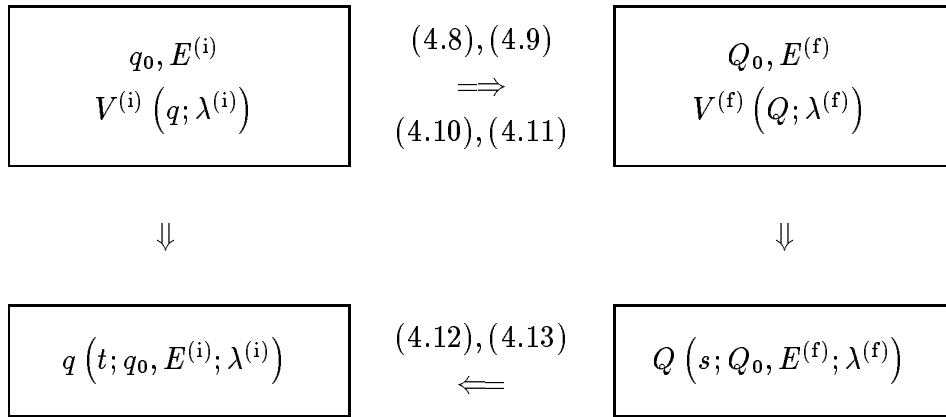


Abbildung 4.1: In einer einzelnen Raumdimension führt eine nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation zu einer Abbildung zwischen zwei klassischen Systemen, bei der sich die Anfangsbedingungen, die skalaren Potentiale und die Trajektorien ineinander transformieren.

Ferner geht aus (2.81), (4.1)–(4.4) und (4.7) hervor, daß sich die skalaren Potentiale  $V^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  und  $V^{(f)}(Q; \lambda^{(f)})$  klassisch gemäß

$$V^{(f)}(Q; \lambda^{(f)}) = q'(Q; \lambda^{(i)})^2 \{V^{(i)}(q(Q; \lambda^{(i)}); \lambda^{(i)}) - E^{(i)}\} \quad (4.10)$$

transformieren. Vergleicht man in (4.10) die funktionalen Abhängigkeiten in der neuen Raumkoordinate  $Q$ , dann gewinnt man eine Beziehung zwischen den Parametersätzen  $\lambda^{(i)}$  und  $\lambda^{(f)}$ , die noch von der Energie  $E^{(i)}$  abhängt:

$$\lambda^{(f)} = \lambda^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}) . \quad (4.11)$$

Der Zusammenhang  $s = s(t; q_0, E^{(i)}; \lambda^{(i)})$  zwischen den Zeitkoordinaten  $t$  und  $s$  läßt sich schließlich nach (2.83), (4.3), (4.4), (4.7)–(4.9) und (4.11) aus einer impliziten Gleichung bestimmen, wenn die Trajektorie des Endsystems  $Q(s; Q_0, E^{(f)}; \lambda^{(f)})$  bekannt ist:

$$t = \int_0^{s(t; q_0, E^{(i)}; \lambda^{(i)})} q'(Q(\sigma; Q(q_0; \lambda^{(i)}), 0; \lambda^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})); \lambda^{(i)})^2 d\sigma . \quad (4.12)$$

Die Trajektorie des Ausgangssystems  $q(t; q_0, E^{(i)}; \lambda^{(i)})$  ist dann durch (2.82), (4.3), (4.8), (4.9) (4.11) und (4.12) festgelegt:

$$q(t; q_0, E^{(i)}; \lambda^{(i)}) = q(Q(s(t; q_0, E^{(i)}; \lambda^{(i)}); Q(q_0; \lambda^{(i)}), 0; \lambda^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})); \lambda^{(i)}) . \quad (4.13)$$

### 4.1.4 Quantenmechanik

Auch die in Abschnitt 3.4 zusammengefaßten Ergebnisse der nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen in der Quantenmechanik werden durch die Einführung der Potentialparameter und durch die Spezialisierung auf eine Raumdimension modifiziert:

$$\begin{array}{ccc}
 \boxed{V^{(i)}(q; \lambda^{(i)})} & \xrightarrow{(4.14), (4.15)} & \boxed{V^{(f)}(Q; \lambda^{(f)})} \\
 \Downarrow & \Rightarrow & \Downarrow \\
 \boxed{G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0; \lambda^{(i)})} & \xleftarrow{(4.17)} & \boxed{G_c^{(f)}(Q, s; Q_0, 0; \lambda^{(f)})}
 \end{array}$$

Abbildung 4.2: In einer einzelnen Raumdimension führt eine nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformation zu einer Abbildung zwischen zwei quantenmechanischen Systemen, bei der sich die skalaren Potentiale und die kausalen Propagatoren ineinander transformieren lassen.

Die quantenmechanische Transformation des Potentials geht nach (3.171), (4.1)–(4.4) und (4.7) in das bekannte Resultat von Duru und Kleinert [82, Kap. 14] über:

$$\begin{aligned}
 V^{(f)}(Q; \lambda^{(f)}) &= q'(Q; \lambda^{(i)})^2 \left\{ V^{(i)}(q(Q; \lambda^{(i)}); \lambda^{(i)}) - E^{(i)} \right\} \\
 &+ \frac{\hbar^2}{m} \left\{ \frac{3}{8} \frac{q''(Q; \lambda^{(i)})^2}{q'(Q; \lambda^{(i)})^2} - \frac{1}{4} \frac{q'''(Q; \lambda^{(i)})}{q'(Q; \lambda^{(i)})} \right\}. \quad (4.14)
 \end{aligned}$$

Wie in der klassischen Mechanik führt ein Vergleich der funktionalen Abhängigkeiten in der neuen Raumkoordinate  $Q$  zu einer Beziehung zwischen den Parametersätzen  $\lambda^{(i)}$  und  $\lambda^{(f)}$ , die diesmal aber neben der Energie  $E^{(i)}$  noch das Plancksche Wirkungsquantum  $\hbar = 2\pi\hbar$  enthält:

$$\lambda^{(f)} = \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}). \quad (4.15)$$

Aus (4.10) und (4.14) ist abzulesen, daß diese quantenmechanische Beziehung (4.15) im Grenzübergang  $\hbar \rightarrow 0$  in die entsprechende klassische Beziehung (4.11) übergehen muß:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}) = \lambda^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}). \quad (4.16)$$

Setzt man (4.3), (4.4), (4.7) und (4.15) in (3.172) ein, so erhält man die von Duru und Kleinert [82, Kap. 14] abgeleitete Transformation zwischen dem kausalen Propagator des Ausgangssystems  $G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0; \lambda^{(i)})$  und dem des Endsystems  $G_c^{(f)}(Q, s; Q_0, 0; \lambda^{(f)})$ :

$$G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0; \lambda^{(i)}) = \sqrt{q'(Q(q; \lambda^{(i)}); \lambda^{(i)}) q'(Q(q_0; \lambda^{(i)}); \lambda^{(i)})} \int_0^{+\infty} ds \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dE^{(i)}}{2\pi\hbar} \cdot \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E^{(i)}(t - t_0)\right\} G_c^{(f)}(Q(q; \lambda^{(i)}), s; Q(q_0; \lambda^{(i)}), 0; \lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})) . \quad (4.17)$$

Eine Interpretation von (4.17) ergibt sich, indem man die Fouriertransformierten der kausalen Propagatoren  $G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0; \lambda^{(i)})$  und  $G_c^{(f)}(Q, s; Q_0, 0; \lambda^{(f)})$  bezüglich der Zeitkoordinaten  $t$  und  $s$ , die Greenschen Funktionen  $G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)})$  und  $G_c^{(f)}(Q, Q_0; E^{(f)}; \lambda^{(f)})$ , einführt:

$$G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0; \lambda^{(i)}) = \int_{-\infty}^{+\infty} G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)}) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} E^{(i)}(t - t_0)\right\} \frac{dE^{(i)}}{2\pi\hbar} , \quad (4.18)$$

$$G_c^{(f)}(Q, Q_0; E^{(f)}; \lambda^{(f)}) = \int_0^{+\infty} G_c^{(f)}(Q, s; Q_0, 0; \lambda^{(f)}) \exp\left\{+\frac{i}{\hbar} E^{(f)} s\right\} ds . \quad (4.19)$$

Unter Berücksichtigung von (4.18) und (4.19) geht die Transformationsformel für kausale Propagatoren (4.17) in eine entsprechende für Greensche Funktionen über. Es zeigt sich, daß die Greensche Funktion des Ausgangssystems  $G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)})$  direkt proportional zur Greenschen Funktion des Endsystems  $G_c^{(f)}(Q, Q_0; E^{(f)}; \lambda^{(f)})$  mit dem Energieeigenwert  $E^{(f)} = 0$  ist, wenn die Raumkoordinaten  $Q, Q_0$  und der Parametersatz  $\lambda^{(f)}$  gemäß (4.3) und (4.15) substituiert werden:

$$G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)}) = \sqrt{q'(Q(q; \lambda^{(i)}); \lambda^{(i)}) q'(Q(q_0; \lambda^{(i)}); \lambda^{(i)})} \cdot G_c^{(f)}(Q(q; \lambda^{(i)}), Q(q_0; \lambda^{(i)}); 0; \lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})) . \quad (4.20)$$

## 4.2 Problemstellung

Im folgenden wird ausführlich ein Beispiel untersucht, bei dem das Morse-Potential

$$V^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) = V_0 e^{-4\alpha q} - 2\gamma V_0 e^{-2\alpha q} , \quad q \in (-\infty, +\infty) \quad (4.21)$$

mit den Parametern

$$\lambda^{(i)} = \{V_0, \alpha, \gamma\} \quad (4.22)$$

das Ausgangssystem darstellt (vgl. Abbildung 4.3). Im Spezialfall  $\gamma = 1$  geht (4.21) in ein Modellpotential über, das ursprünglich von Morse [93] eingeführt wurde, um die Schwingungen eines zweiatomigen Moleküls durch einen anharmonischen Oszillator zu beschreiben [60, S. 158]. Dabei wird die Raumkoordinate  $q$  mit der Differenz  $r - r_0$  zwischen dem Abstand  $r$  der beiden Atome und dem Gleichgewichtsabstand  $r_0$  identifiziert.

Das Endsystem besteht aus dem Potential des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere

$$V^{(f)}(Q; \lambda^{(f)}) = \frac{m}{2} \omega^2 Q^2 + \frac{g}{Q^2} + C, \quad Q \in (0, +\infty), \quad (4.23)$$

das die Parameter

$$\lambda^{(f)} = \{ \omega, g, C \} \quad (4.24)$$

besitzt (vgl. Abbildung 4.3). Es tritt beispielsweise als Radialanteil des dreidimensionalen harmonischen Oszillators auf.

In den nächsten beiden Abschnitten wird gezeigt, daß die beiden Potentiale (4.21) und (4.23) sowohl in der klassischen Mechanik als auch in der Quantenmechanik durch die nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation (4.3) und (4.4) mit der Bedingung (4.7) ineinander abbildbar sind, wenn man die Langer-Transformation [89]

$$q(Q; \lambda^{(i)}) = -\frac{1}{\alpha} \ln Q \quad \Longleftrightarrow \quad Q(q; \lambda^{(i)}) = e^{-\alpha q} \quad (4.25)$$

als Raumtransformation verwendet (vgl. Abbildung 4.3). Darüber hinaus wird es gelingen, die entsprechenden klassischen Trajektorien und quantenmechanischen kausalen Propagatoren ineinander zu überführen.

### 4.3 Klassische Mechanik

Zunächst wird die Beziehung zwischen den Parametern (4.22) des Morse-Potentials und den Parametern (4.24) des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere berechnet. Hierzu setzt man (4.21), (4.23) und (4.25) in die klassische Transformationsformel für Potentiale (4.10) ein und erhält durch einen Koeffizientenvergleich

$$\omega(V_0, \alpha, \gamma, E^{(i)}) = \sqrt{\frac{2V_0}{m\alpha^2}}, \quad (4.26)$$

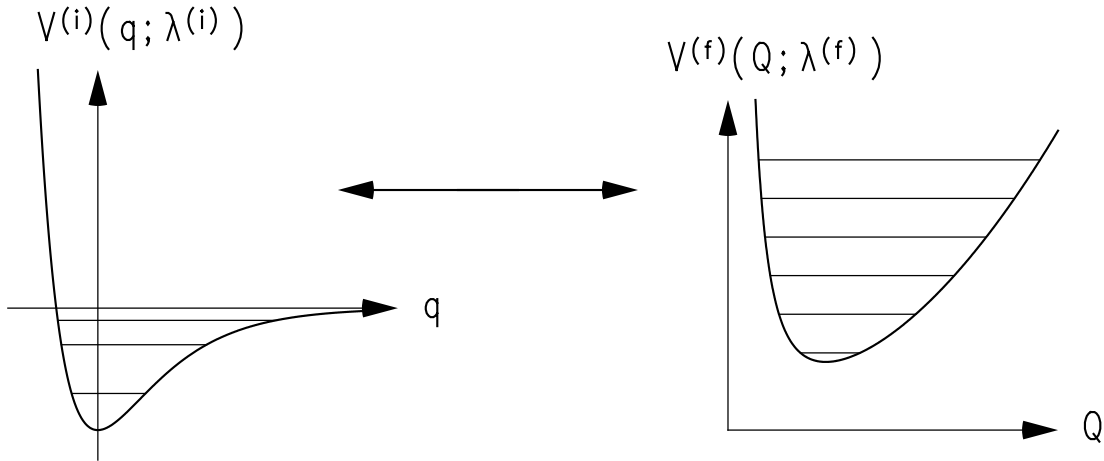


Abbildung 4.3: Eine nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation vermittelt eine Abbildung zwischen dem Morse-Potential  $V^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  und dem Potential des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere  $V^{(f)}(Q; \lambda^{(f)})$ .

$$g(V_0, \alpha, \gamma, E^{(i)}) = -\frac{E^{(i)}}{\alpha^2}, \quad (4.27)$$

$$C(V_0, \alpha, \gamma, E^{(i)}) = -\frac{2\gamma V_0}{\alpha^2}. \quad (4.28)$$

Anschließend wird das Newtonsche Anfangswertproblem für das Potential des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere (4.23) gelöst. Hierzu nimmt man im Energieerhaltungssatz eine Separation der Variablen vor, wertet die elementare Quadratur mit [48, (2.261)] aus und arbeitet die Anfangsbedingungen ein. Das Ergebnis lautet

$$Q(s; Q_0, E^{(f)}; \lambda^{(f)}) = \left\{ \frac{E^{(f)} - C}{m\omega^2} + \left( Q_0^2 - \frac{E^{(f)} - C}{m\omega^2} \right) \cos[2\omega s] \right. \\ \left. \pm \left( 2 \frac{E^{(f)} - C}{m\omega^2} Q_0^2 - Q_0^4 - \frac{2g}{m\omega^2} \right)^{\frac{1}{2}} \sin[2\omega s] \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (4.29)$$

wobei im Falle einer positiven (negativen) Geschwindigkeit zum Anfangszeitpunkt  $s_0 = 0$  das Pluszeichen (Minuszeichen) zu verwenden ist. Es ist bemerkenswert, daß die Frequenz der zeitlich oszillierenden Lösung (4.29) nicht von der Anfangsauslenkung  $Q_0$  abhängt.

Nach diesen Vorbereitungen kann der Zusammenhang zwischen den beiden Zeitkoordinaten  $t$  und  $s$  des Ausgangs- und des Endsystems aus der impliziten Gleichung

chung (4.12) bestimmt werden, indem man (4.25)–(4.29) einsetzt. Da die Langer-Transformation (4.25) monoton fallend ist, hat man sich dabei in (4.29) auf das Minuszeichen zu beschränken. Beachtet man [48, (2.558.4)], so ergibt sich dieser Zusammenhang zu

$$s(t; q_0, E^{(i)}; \lambda^{(i)}) = \sqrt{\frac{m\alpha^2}{2V_0}} \operatorname{arccctg} \left\{ \sqrt{\frac{-E^{(i)}}{V_0}} e^{2\alpha q_0} \operatorname{ctg} \left[ \sqrt{\frac{-2\alpha^2 E^{(i)}}{m}} t \right] + \sqrt{\frac{E^{(i)}}{V_0} e^{4\alpha q_0} + 2\gamma e^{2\alpha q_0} - 1} \right\}. \quad (4.30)$$

Die Lösung des Newtonschen Anfangswertproblems für das Morse-Potential (4.21) resultiert aus der Transformationsformel für Trajektorien (4.13) und (4.25)–(4.30). Nach einigen elementaren trigonometrischen Umformungen gewinnt man das Resultat

$$q(t; q_0, E^{(i)}; \lambda^{(i)}) = \frac{1}{2\alpha} \ln \left\{ -\frac{\gamma V_0}{E^{(i)}} + \left( \frac{\gamma V_0}{E^{(i)}} + e^{2\alpha q_0} \right) \cos \left[ \sqrt{\frac{-8\alpha^2 E^{(i)}}{m}} t \right] + \sqrt{\frac{V_0}{E^{(i)}} - \frac{2\gamma V_0}{E^{(i)}} e^{2\alpha q_0} - e^{4\alpha q_0}} \sin \left[ \sqrt{\frac{-8\alpha^2 E^{(i)}}{m}} t \right] \right\}, \quad (4.31)$$

das auch durch Separation der Variablen im entsprechenden Energieerhaltungssatz und [48, (2.266)] erzielt werden kann.

## 4.4 Quantenmechanik

Dieselbe nichtintegrierte Raum-Zeit-Transformation wie in der klassischen Mechanik ermöglicht nun in der Quantenmechanik, den kausalen Propagator des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere in die Greensche Funktion des Morse-Potentials zu transformieren. Anschließend werden die diskreten und die kontinuierlichen Spektraldaten des Morse-Potentials mit Hilfe der Spektraldarstellung der Greenschen Funktion rekonstruiert.

### 4.4.1 Greensche Funktion des Morse-Potentials

Der quantenmechanischen Transformationsformel für Potentiale (4.14) ist zu entnehmen, daß das Morse-Potential (4.21) durch die Langer-Transformation (4.25)

in das Potential des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere (4.23) abgebildet wird. Hierbei liefert der Koeffizientenvergleich eine Beziehung zwischen den Parametern  $\lambda^{(i)}$  und  $\lambda^{(f)}$  der beiden quantenmechanischen Systeme

$$\omega_{\hbar} (V_0, \alpha, \gamma, E^{(i)}) = \sqrt{\frac{2V_0}{m\alpha^2}}, \quad (4.32)$$

$$g_{\hbar} (V_0, \alpha, \gamma, E^{(i)}) = -\frac{E^{(i)}}{\alpha^2} - \frac{\hbar^2}{8m}, \quad (4.33)$$

$$C_{\hbar} (V_0, \alpha, \gamma, E^{(i)}) = -\frac{2\gamma V_0}{\alpha^2}, \quad (4.34)$$

die gemäß (4.16) im Grenzfall  $\hbar \rightarrow 0$  in das klassische Ergebnis (4.26)–(4.28) übergeht. Um den kausalen Propagator des Endsystems zu berechnen, kann man sich beispielsweise der Methode der Pfadintegrale bedienen. Im Falle des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere (4.23) erfordert dies unter anderem die Anwendung des Spiegelungsprinzips [46, 71, 97], da der Definitionsbereich durch die Zentrifugalbarriere auf die positive reelle Achse beschränkt ist. Die explizite Auswertung des Pfadintegrals liefert [28, 96, 97]

$$G_c^{(f)} (Q, s; Q_0, 0; \lambda^{(f)}) = \Theta(s) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} C s \right\} \frac{m\omega}{i\hbar \sin[\omega s]} \sqrt{Q Q_0} \\ \cdot I_{\nu} \left( \frac{m\omega}{i\hbar \sin[\omega s]} Q Q_0 \right) \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar} \text{ctg}[\omega s] (Q^2 + Q_0^2) \right\}, \quad (4.35)$$

wobei der Index  $\nu$  der modifizierten Besselfunktion 1. Gattung  $I_{\nu}$  [8, S. 441] gegeben ist durch

$$\nu = \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{8m}{\hbar^2} g}. \quad (4.36)$$

Setzt man (4.25) und (4.32)–(4.36) in die Transformationsformel für kausale Propagatoren (4.17) ein, so gewinnt man einen Ausdruck für den gesuchten kausalen Propagator  $G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0; \lambda^{(i)})$  des Morse-Potentials (4.21). Es stellt sich heraus, daß dieser kausale Propagator nicht explizit analytisch angebar ist, da die Integration über den Energieparameter  $E^{(i)}$  mit den zur Verfügung stehenden Integrationstafeln nicht durchführbar ist. Deshalb soll anstelle des kausalen Propagators  $G_c^{(i)}(q, t; q_0, t_0; \lambda^{(i)})$  dessen Fouriertransformierte bezüglich der Zeit, die Greensche Funktion  $G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)})$ , betrachtet werden. Die Transformationsformel für kausale Propagatoren (4.17) und die Definition (4.18) führen dann zu einer Vorschrift, wie sich die Greensche Funktion  $G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)})$  des Morse-Potentials (4.21) aus dem kausalen Propagator  $G_c^{(f)}(Q, s; Q_0, 0; \lambda^{(f)})$  zum Potential des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere (4.23) bestimmen läßt:

$$G_c^{(i)} (q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)}) = \sqrt{q' (Q(q; \lambda^{(i)}); \lambda^{(i)}) q' (Q(q_0; \lambda^{(i)}); \lambda^{(i)})}$$

$$\int_0^{+\infty} G_c^{(f)} \left( Q(q; \lambda^{(i)}), s; Q(q_0; \lambda^{(i)}), 0; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}) \right) ds. \quad (4.37)$$

Mit Hilfe von (4.25) und (4.32)–(4.36) erhält man aus (4.37)

$$G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)}) = \int_0^{+\infty} \exp \left\{ \frac{2i\gamma V_0}{\hbar\alpha^2} s \right\} I_k \left( \frac{\beta}{i\gamma \sin \left[ \sqrt{\frac{2V_0}{m\alpha^2}} s \right]} e^{-\alpha(q+q_0)} \right) \cdot \frac{\beta}{i\alpha\gamma \sin \left[ \sqrt{\frac{2V_0}{m\alpha^2}} s \right]} \exp \left\{ \frac{i\beta}{2\gamma} \operatorname{ctg} \left[ \sqrt{\frac{2V_0}{m\alpha^2}} s \right] (e^{-2\alpha q} + e^{-2\alpha q_0}) \right\} ds, \quad (4.38)$$

wobei  $\beta$  die eine dimensionslose Abkürzung

$$\beta = \sqrt{\frac{\gamma^2 V_0}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}} \quad (4.39)$$

bezeichnet und die Greensche Funktion  $G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)})$  nur über die andere dimensionslose Abkürzung

$$k = \sqrt{\frac{-E^{(i)}}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}} \quad (4.40)$$

vom Energieparameter  $E^{(i)}$  abhängt. Um die verbleibende Integration in (4.38) ausführen zu können, müssen noch zwei vorbereitende Nebenrechnungen vorgenommen werden. Zunächst wird eine Wick-Rotation [31, S. 212] durchgeführt, das heißt, daß die reelle Zeitkoordinate  $s$  durch die umskalierte imaginäre Variable  $u$  ersetzt wird:

$$u(s) = i \sqrt{\frac{2V_0}{m\alpha^2}} s. \quad (4.41)$$

Dann substituiert man noch die Integrationsvariable  $u$  durch  $v$

$$u(v) = \operatorname{arsinh} \left[ \frac{1}{\sinh v} \right], \quad (4.42)$$

so daß schließlich (4.38) übergeht in

$$G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)}) = \frac{m}{i\hbar\alpha} \int_0^{+\infty} \left( \cosh \frac{v}{2} \right)^\beta I_k \left( \frac{\beta}{\gamma} e^{-\alpha(q+q_0)} \sinh v \right) \cdot \exp \left\{ -\frac{\beta}{2\gamma} (e^{-2\alpha q} + e^{-2\alpha q_0}) \cosh v \right\} dv. \quad (4.43)$$



Die Integrationsformel [48, (6.669.4)] ermöglicht es nun, einen vollständigen analytischen Ausdruck für die Greensche Funktion des Morse-Potentials (4.21) zu gewinnen [12, 27, 38, 51, 95]:

$$G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)}) = \frac{m\gamma}{i\hbar\alpha\beta} e^{\alpha(q+q_0)} \frac{\Gamma\left(\frac{1+k-\beta}{2}\right)}{\Gamma(1+k)} \left[ \Theta(q - q_0) M_{\frac{\beta}{2}, \frac{k}{2}}\left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-2\alpha q}\right) \cdot W_{\frac{\beta}{2}, \frac{k}{2}}\left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-2\alpha q_0}\right) + \Theta(q_0 - q) M_{\frac{\beta}{2}, \frac{k}{2}}\left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-2\alpha q_0}\right) W_{\frac{\beta}{2}, \frac{k}{2}}\left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-2\alpha q}\right) \right]. \quad (4.44)$$

Hierbei bezeichnen  $M_{\lambda, \mu}$  und  $W_{\lambda, \mu}$  die Whittaker-Funktionen [10].

#### 4.4.2 Spektraldarstellung der Greenschen Funktion

Die Greensche Funktion  $G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)})$  setzt sich gemäß der Spektraldarstellung [82, S. 374], [116, S. 43] aus den Energieeigenwerten und den Energieeigenfunktionen des entsprechenden Hamiltonoperators  $\hat{H}^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  zusammen (vgl. Abschnitt 5.1.3). Für den Fall eines quantenmechanischen Systems, das sowohl ein diskretes als auch ein kontinuierliches Spektrum besitzt, lautet diese Spektraldarstellung

$$G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)}) = \sum_{n=1}^{N^{(i)}(\lambda^{(i)})} \psi_n^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) \frac{i\hbar}{E^{(i)} - E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})} \psi_n^{(i)*}(q_0; \lambda^{(i)}) + \int_{E^{(i)}(\lambda^{(i)})}^{+\infty} \psi_E^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) \frac{i\hbar}{E^{(i)} - E} \psi_E^{(i)*}(q_0; \lambda^{(i)}) dE. \quad (4.45)$$

Beachtet man die analytische Fortsetzung von (4.45) bezüglich des Energieparameters  $E^{(i)}$ , dann gewinnt man ein Verfahren, mit dem sich die Spektraldaten aus einer bekannten Greenschen Funktion rekonstruieren lassen (vgl. Abbildung 4.4):

1. Die einfachen Pole der Greenschen Funktion  $G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)})$  stimmen mit den diskreten Energieeigenwerten  $E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  überein. Die dazugehörigen diskreten Energieeigenfunktionen  $\psi_n^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  sind durch die Residuen dieser einfachen Pole gegeben:

$$\psi_n^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) \psi_n^{(i)*}(q_0; \lambda^{(i)}) = \frac{1}{i\hbar} \operatorname{Res}_{E^{(i)}=E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})} G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)}). \quad (4.46)$$

Die Anzahl  $N^{(i)}(\lambda^{(i)})$  der diskreten Spektraldaten kann dabei mit den Parametern  $\lambda^{(i)}$  des Potentials  $V^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  variieren.

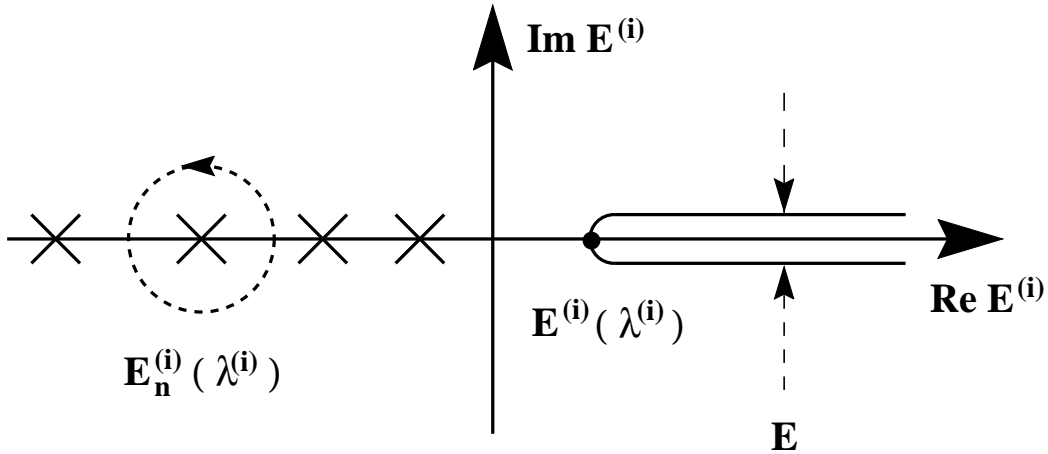


Abbildung 4.4: Setzt man die Greensche Funktion  $G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)})$  bezüglich des Energieparameters  $E^{(i)}$  analytisch fort, so lassen sich die diskreten und die kontinuierlichen Spektraldaten des quantenmechanischen Systems rekonstruieren.

- Die kontinuierlichen Energieeigenwerte  $E$  entsprechen der Definitionslücke der Greenschen Funktion  $G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)})$  im Intervall  $[E^{(i)}(\lambda^{(i)}), +\infty)$ . Der Sprung der Greenschen Funktion  $G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)})$  an dieser Definitionslücke führt zu den kontinuierlichen Energieeigenfunktionen  $\psi_E^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$ :

$$\psi_E^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) \psi_E^{(i)*}(q_0; \lambda^{(i)}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \cdot \lim_{\epsilon \downarrow 0} \left\{ G_c^{(i)}(q, q_0; E + i\epsilon; \lambda^{(i)}) - G_c^{(i)}(q, q_0; E - i\epsilon; \lambda^{(i)}) \right\}. \quad (4.47)$$

Im folgenden wird dieses Verfahren angewendet, um aus der Greenschen Funktion (4.44) des Morse-Potentials (4.21) sowohl die diskreten als auch die kontinuierlichen Spektraldaten zu rekonstruieren.

### 4.4.3 Diskrete Spektraldaten des Morse-Potentials

Die Greensche Funktion (4.44) besitzt bezüglich des Energieparameters  $E^{(i)}$  einfache Pole, wenn das Argument der Gamma-Funktion im Zähler mit einer negativen ganzen Zahl übereinstimmt [48, (8.310.2)]:

$$\frac{1}{2} \{1 + k - \beta\} = -n, \quad n = 0, 1, \dots \quad (4.48)$$

Hieraus erhält man mit den Definitionen (4.39) und (4.40) die diskreten Energieeigenwerte des Morse-Potentials (4.21):

$$E_n^{(i)}(\lambda^{(i)}) = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \left\{ \sqrt{\frac{\gamma^2 V_0}{\hbar^2 \alpha^2}} - 1 - 2n \right\}^2. \quad (4.49)$$

Da die dimensionslose Abkürzung  $k$  nach (4.40) positiv ist, führt (4.48) ferner zu einer einschränkenden Bedingung für die erlaubten Quantenzahlen  $n$ :

$$\sqrt{\frac{\gamma^2 V_0}{\hbar^2 \alpha^2}} - 1 - 2n \geq 0. \quad (4.50)$$

Um die entsprechenden diskreten Energieeigenfunktionen zu bestimmen, muß man (4.44) in (4.46) einsetzen. Die Auswertung des Residuums an den einfachen Polen  $E^{(i)} = E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  erfolgt dabei nach der Vorschrift [8, (3.90)]

$$\operatorname{Res}_{z=z_0} f(z) = \lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0) f(z) \quad (4.51)$$

und unter Beachtung der Residuen der Gamma-Funktion [48, (8.310.2)]. Mit [48, (9.220.4)] lassen sich dann die Whittaker-Funktionen  $W_{\lambda, \mu}$  auf die Whittaker-Funktionen  $M_{\lambda, \mu}$  zurückführen, wobei diese nach [48, (8.972.1)] und [48, (9.220.2)] mit den verallgemeinerten Laguerre-Polynomen  $L_n^{(\nu)}$  in Verbindung stehen. Nutzt man noch die Eigenschaft [48, (8.331)] der Gamma-Funktion aus, so ergeben sich die diskreten Energieeigenfunktionen des Morse-Potentials (4.21) zu

$$\begin{aligned} \psi_n^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) &= \sqrt{2\alpha(\beta - 1 - 2n) \frac{\Gamma(1+n)}{\Gamma(\beta - n)}} \left( \frac{\beta}{\gamma} e^{-2\alpha q} \right)^{\frac{\beta-1-2n}{2}} \\ &\cdot \exp \left\{ -\frac{\beta}{2\gamma} e^{-2\alpha q} \right\} L_n^{(\beta-1-2n)} \left( \frac{\beta}{\gamma} e^{-2\alpha q} \right). \end{aligned} \quad (4.52)$$

Mit Hilfe von [48, (7.414.3)] und [48, (8.974.3)] kann man sich davon überzeugen, daß diese diskreten Energieeigenfunktionen automatisch normiert sind:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) \psi_{n'}^{(i)*}(q; \lambda^{(i)}) dq = \delta_{n, n'}. \quad (4.53)$$

#### 4.4.4 Kontinuierliche Spektraldaten des Morse-Potentials

Die Definitionslücke der Greenschen Funktion (4.44) bezüglich des Energieparameters  $E^{(i)}$  besteht aufgrund der Wurzelfunktion (4.40) aus der positiven reellen

Achse [120, S. 56]. Demnach liegen die kontinuierlichen Energieeigenwerte  $E$  des Morse-Potentials (4.21) im Intervall  $[0, +\infty)$  vor. Die dazugehörigen Energieeigenfunktionen ergeben sich, wenn man den Sprung der Greenschen Funktion (4.44) an dieser Definitionslücke gemäß (4.47) auswertet. Wegen (4.40) treten dabei die Grenzwerte

$$\lim_{\epsilon \downarrow 0} \sqrt{-E \pm i\epsilon} = \pm i\sqrt{E} \quad (4.54)$$

auf, so daß als neue dimensionslose Abkürzung

$$\kappa = \sqrt{\frac{E}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}} \quad (4.55)$$

eingeführt wird. Beachtet man noch die Beziehung [48, (9.220.4)] zwischen den Whittaker-Funktionen  $M_{\lambda, \mu}$  und den Whittaker-Funktionen  $W_{\lambda, \mu}$ , dann erhält man für die kontinuierlichen Energieeigenfunktionen des Morse-Potentials (4.21) das explizite Ergebnis

$$\psi_E^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) = \sqrt{\frac{m\gamma}{2\pi\hbar^2\alpha\beta\kappa} \frac{\Gamma\left(\frac{1-\beta+i\kappa}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1-\beta-i\kappa}{2}\right)}{\Gamma(i\kappa)\Gamma(-i\kappa)}} e^{\alpha q} W_{\frac{\beta}{2}, \frac{i\kappa}{2}}\left(\frac{\beta}{\gamma} e^{-2\alpha q}\right). \quad (4.56)$$

Die Normiertheit dieser kontinuierlichen Energieeigenfunktionen läßt sich durch eine besondere Integraldarstellung der Delta-Funktion [51] nachweisen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_E^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) \psi_{E'}^{(i)*}(q; \lambda^{(i)}) dq = \delta(E - E'). \quad (4.57)$$



*Mathematischer Rigorismus von  
großer Präzision ist in der Physik  
nicht unbedingt empfehlenswert.  
R.P. Feynman (1918 – 1988)*

## Kapitel 5

# Abbildungen von Spektraldaten

Das Beispiel des vorangegangenen Kapitels hat eindrucksvoll gezeigt, daß nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen zwei quantenmechanische Systeme aufeinander abbilden können, bei denen das eine sowohl ein diskretes als auch ein kontinuierliches Spektrum besitzt, während das andere lediglich ein diskretes Spektrum aufweist (vgl. Abbildung 4.3). Deshalb soll im vorliegenden Kapitel näher untersucht werden, wie sich nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen auf die Abbildung quantenmechanischer Spektraldaten auswirken.

Nachdem in Abschnitt 5.1 die abschnittsweise Darstellung und die Spektraldarstellung der Greenschen Funktion unabhängig voneinander eingeführt worden sind, wird in Abschnitt 5.2 die Beziehung zwischen beiden behandelt. Durch Verallgemeinerung der Sommerfeld-Watson-Transformation [122, 127, 128] der Streutheorie [1, 7, 106] wird ein heuristisches Verfahren entwickelt, mit dem aus der Spektraldarstellung der Greenschen Funktion die abschnittsweise Darstellung hergeleitet werden kann. Diese vorbereitenden Überlegungen werden dann in Abschnitt 5.3 in der Transformationsformel (4.20) für Greensche Funktionen angewendet, um die Konsequenzen nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen für die Abbildung von Spektraldaten studieren zu können. Es zeigt sich, daß bei einer nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformation zwischen zwei quantenmechanischen Systemen die untersten diskreten Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen eineindeutig aufeinander abgebildet werden. Außerdem wird eine konkrete Vorschrift angegeben, wie diskrete in kontinuierliche Energieeigenfunktionen konvertiert werden können. Abschnitt 5.4 dient schließlich dazu, die gewonnenen Abbildungen von Spektraldaten anhand des nichttrivialen Beispiels von Kapitel 4 zu diskutieren.

## 5.1 Darstellungen der Greenschen Funktion

In diesem Abschnitt werden einige elementare Eigenschaften der Greenschen Funktion zusammengetragen. Nachdem die Greensche Funktion als eindeutige Lösung eines Randwertproblems definiert worden ist, werden zwei Darstellungen der Greenschen Funktion diskutiert. Zunächst wird die abschnittsweise Darstellung betrachtet, die einen geschlossenen Ausdruck für die Greensche Funktion liefert. Anschließend wird unabhängig davon die Spektraldarstellung der Greenschen Funktion eingeführt, in der alle Spektraldaten des zugrunde liegenden Hamilton-Operators eingehen.

### 5.1.1 Randwertproblem

Für die folgenden Überlegungen ist es ausreichend, ein einzelnes quantenmechanisches System zu betrachten. Deshalb werden bis auf weiteres in der Notation die Indizes (i), (f) und die Abhängigkeiten physikalischer Größen von den Parametersätzen  $\lambda^{(i)}$ ,  $\lambda^{(f)}$  unterdrückt. Der Hamilton-Operator einer Punktmasse  $m$ , die sich entlang einer Raumkoordinate  $Q$  unter dem Einfluß des konservativen Potentials  $V(Q)$  bewegt, lautet dann

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial Q^2} + V(Q). \quad (5.1)$$

Um die Notation noch weiter zu vereinfachen, soll nur der Fall berücksichtigt werden, daß das quantenmechanische System ein rein diskretes Energiespektrum besitzt. Dann kann man annehmen, daß das Potential  $V(Q)$  an den Rändern seines Definitionsbereiches  $I = (a, b)$  unbeschränkt anwächst:

$$\lim_{Q \rightarrow a} V(Q) = \lim_{Q \rightarrow b} V(Q) = +\infty. \quad (5.2)$$

Die Greensche Funktion  $G_c(Q, Q_0; E)$  eines solchen Systems ist eindeutig durch ein Randwertproblem definiert [15, S. 142]:

- Die Greensche Funktion  $G_c(Q, Q_0; E)$  genügt der inhomogenen Schrödinger-Gleichung:

$$\{ \hat{H} - E \} G_c(Q, Q_0; E) = -i\hbar \delta(Q - Q_0). \quad (5.3)$$

- An den Rändern des Definitionsbereiches  $I = (a, b)$  erfüllt die Greensche Funktion  $G_c(Q, Q_0; E)$  die Dirichletschen Randbedingungen

$$G_c(a, Q_0; E) = G_c(b, Q_0; E) = 0. \quad (5.4)$$

### 5.1.2 Abschnittsweise Darstellung

Eine Methode, das Randwertproblem (5.3), (5.4) zu lösen, besteht darin, die beiden Fälle  $a \leq Q_0 < Q \leq b$  und  $a \leq Q < Q_0 \leq b$  getrennt zu untersuchen. Da dies den Punkt  $Q = Q_0$  ausschließt, reduziert sich die inhomogene Schrödinger-Gleichung (5.3) auf den homogenen Teil:

$$\{ \hat{H} - E \} G_c(Q, Q_0; E) = 0, \quad Q \neq Q_0. \quad (5.5)$$

Die dabei vernachlässigte Delta-Funktion  $\delta(Q - Q_0)$  bewirkt, daß die Lösungen der homogenen Schrödinger-Gleichung (5.5) für  $a \leq Q_0 < Q \leq b$  und  $a \leq Q < Q_0 \leq b$  spezielle Anschlußbedingungen an der Stelle  $Q = Q_0$  erfüllen [15, S. 142]:

- Die Greensche Funktion  $G_c(Q, Q_0; E)$  ist stetig an der Stelle  $Q = Q_0$ :

$$\lim_{\epsilon \downarrow 0} \left\{ G_c(Q_0 + \epsilon, Q_0; E) - G_c(Q_0 - \epsilon, Q_0; E) \right\} = 0. \quad (5.6)$$

- Betrachtet man das Integral der inhomogenen Schrödinger-Gleichung (5.3) bezüglich der Raumkoordinate  $Q$  im Intervall  $[Q_0 - \epsilon, Q_0 + \epsilon]$  für kleine  $\epsilon > 0$ , so gewinnt man im Grenzübergang  $\epsilon \downarrow 0$  eine Sprungbedingung für die Ableitung der Greenschen Funktion  $G_c(Q, Q_0; E)$ . Dabei stellt sich heraus, daß diese Sprungbedingung weder vom Potential  $V(Q)$  noch vom Energieparameter  $E$  abhängt:

$$\lim_{\epsilon \downarrow 0} \left\{ \left. \frac{\partial G_c(Q, Q_0; E)}{\partial Q} \right|_{Q=Q_0+\epsilon} - \left. \frac{\partial G_c(Q, Q_0; E)}{\partial Q} \right|_{Q=Q_0-\epsilon} \right\} = \frac{2mi}{\hbar}. \quad (5.7)$$

Mit diesen Überlegungen ist es gelungen, das ursprüngliche Randwertproblem (5.3), (5.4) für die Greensche Funktion  $G_c(Q, Q_0; E)$  in ein dazu äquivalentes (5.4) – (5.7) umzuschreiben. Es soll nun ein geschlossener Ausdruck für die Greensche Funktion  $G_c(Q, Q_0; E)$  gewonnen werden. Der Ansatz

$$\begin{aligned} G_c(Q, Q_0; E) &= \Theta(Q - Q_0) c_1(Q_0; E) \psi^{(1)}(Q; E) \\ &+ \Theta(Q_0 - Q) c_2(Q_0; E) \psi^{(2)}(Q; E) \end{aligned} \quad (5.8)$$

erfüllt gleichzeitig (5.4) und (5.5), wenn beide Funktionen  $\psi^{(1)}(Q; E)$  und  $\psi^{(2)}(Q; E)$  Lösungen der homogenen Schrödinger-Gleichung darstellen, die jeweils einer Randbedingung genügen:

$$\{ \hat{H} - E \} \psi^{(1)}(Q; E) = 0, \quad \psi^{(1)}(b; E) = 0, \quad (5.9)$$



$$\{ \hat{H} - E \} \psi^{(2)}(Q; E) = 0, \quad \psi^{(2)}(a; E) = 0. \quad (5.10)$$

Die beiden Entwicklungskoeffizienten  $c_1(Q_0; E)$  und  $c_2(Q_0; E)$  im Ansatz (5.8) lassen sich dadurch festlegen, daß man noch die Anschlußbedingungen (5.6), (5.7) für die Greensche Funktion  $G_c(Q, Q_0; E)$  an der Stelle  $Q = Q_0$  einarbeitet:

$$\begin{pmatrix} \psi^{(1)}(Q_0; E) & -\psi^{(2)}(Q_0; E) \\ \frac{\partial \psi^{(1)}(Q_0; E)}{\partial Q_0} & -\frac{\partial \psi^{(2)}(Q_0; E)}{\partial Q_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(Q_0; E) \\ c_2(Q_0; E) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{2mi}{\hbar} \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Bestimmt man  $c_1(Q_0, E)$  und  $c_2(Q_0, E)$  aus diesem inhomogenen Gleichungssystem, so führt (5.8) zu einer geschlossenen Lösung des ursprünglichen Randwertproblems (5.3), (5.4) in Form der abschnittswisen Darstellung der Greenschen Funktion:

$$\begin{aligned} G_c(Q, Q_0; E) = \frac{2m}{i\hbar} \frac{1}{W(E)} \left\{ \Theta(Q - Q_0) \psi^{(1)}(Q; E) \psi^{(2)}(Q_0; E) \right. \\ \left. + \Theta(Q_0 - Q) \psi^{(1)}(Q_0; E) \psi^{(2)}(Q; E) \right\}. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Hierbei bezeichnet  $W(E)$  eine Abkürzung für die Wronski-Determinante der beiden Funktionen  $\psi^{(1)}(Q; E)$  und  $\psi^{(2)}(Q; E)$ :

$$W(E) = \psi^{(1)}(Q; E) \frac{\partial \psi^{(2)}(Q; E)}{\partial Q} - \frac{\partial \psi^{(1)}(Q; E)}{\partial Q} \psi^{(2)}(Q; E). \quad (5.13)$$

Berücksichtigt man die Definition des Hamilton-Operators (5.1) und die Bestimmungsgleichungen (5.9), (5.10) der beiden Funktionen  $\psi^{(1)}(Q; E)$ ,  $\psi^{(2)}(Q; E)$ , dann kann man nachprüfen, daß die Wronski-Determinante (5.13) nicht von der Raumkoordinate  $Q$  abhängt:

$$\frac{\partial W(E)}{\partial Q} = 0. \quad (5.14)$$

### 5.1.3 Spektraldarstellung

Eine andere Methode, das Randwertproblem (5.3), (5.4) zu lösen, geht vom Eigenwertproblem des Hamilton-Operators (5.1) aus. Dabei werden die Überlegungen gemäß (5.2) nur für ein quantenmechanisches System durchgeführt, das ausschließlich diskrete Spektraldaten aufweist. Die diskreten Energieeigenwerte  $E_n$  und die diskreten Energieeigenfunktionen  $\psi_n(Q)$  sind durch das Eigenwertproblem

$$\{ \hat{H} - E_n \} \psi_n(Q) = 0, \quad \psi_n(a) = \psi_n(b) = 0 \quad (5.15)$$

definiert. Aufgrund der Hermiteizität des Hamilton-Operators (5.1) bilden die diskreten Energieeigenfunktionen  $\psi_n(Q)$  eine Orthonormalbasis im zugrunde liegenden Hilbert-Raum. Dementsprechend genügen sie der Orthonormalitätsrelation

$$\int_a^b \psi_n(Q) \psi_m^*(Q) dQ = \delta_{nm} \quad (5.16)$$

und der Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(Q) \psi_n^*(Q_0) = \delta(Q - Q_0). \quad (5.17)$$

Nach (5.17) ist es möglich, das Randwertproblem (5.3), (5.4) für die Greensche Funktion  $G_c(Q, Q_0; E)$  durch den Ansatz

$$G_c(Q, Q_0; E) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n(Q_0; E) \psi_n(Q) \quad (5.18)$$

zu lösen. Das Eigenwertproblem (5.15) für die diskreten Energieeigenfunktionen  $\psi_n(Q)$  garantiert, daß die Dirichletschen Randbedingungen (5.4) der Greenschen Funktion  $G_c(Q, Q_0; E)$  erfüllt sind. Setzt man (5.18) in die inhomogene Schrödinger-Gleichung (5.3) ein, so lassen sich die Entwicklungskoeffizienten  $C_n(Q_0; E)$  mit Hilfe von (5.16) und (5.17) bestimmen:

$$C_n(Q_0; E) = \frac{i\hbar}{E - E_n} \psi_n^*(Q_0). \quad (5.19)$$

Aus (5.18) und (5.19) ergibt sich die Spektraldarstellung der Greenschen Funktion  $G_c(Q, Q_0; E)$ , in der alle Spektraldaten des Hamilton-Operators (5.1) eingehen (vgl. Abschnitt 4.4.2):

$$G_c(Q, Q_0; E) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(Q) \frac{i\hbar}{E - E_n} \psi_n^*(Q_0). \quad (5.20)$$

## 5.2 Beziehung zwischen den Darstellungen

Nachdem bisher zwei Darstellungen der Greenschen Funktion unabhängig voneinander diskutiert worden sind, soll im folgenden die Beziehung zwischen beiden untersucht werden. Zunächst wird das Problem betrachtet, die diskreten Spektraldaten aus der abschnittswisen Darstellung der Greenschen Funktion zu rekonstruieren. Die dabei erzielten Ergebnisse ermöglichen in Anlehnung an eine grundlegende

Arbeit von Kleinert und Mustapic [81], die Sommerfeld-Watson-Transformation [122, 127, 128] der Streutheorie [1, 7, 106] zu verallgemeinern. Dadurch gelingt es, die Spektraldarstellung der Greenschen Funktion explizit aufzusummieren und einen geschlossenen Ausdruck in Form der abschnittswisen Darstellung herzuleiten. Abschließend wird dieses Verfahren exemplarisch auf den harmonischen Oszillator mit Zentrifugalbarriere angewendet.

### 5.2.1 Rekonstruktion der diskreten Spektraldaten

Um aus der abschnittswisen Darstellung der Greenschen Funktion (5.12) die diskreten Energieeigenwerte  $E_n$  und die diskreten Energieeigenfunktionen  $\psi_n(Q)$  rekonstruieren zu können, hat man zu beachten, daß sowohl die Funktionen  $\psi^{(1)}(Q; E)$  und  $\psi^{(2)}(Q; E)$  als auch deren Wronski-Determinante  $W(E)$  nicht eindeutig sind. Mit  $\psi^{(1)}(Q; E)$  und  $\psi^{(2)}(Q; E)$  sind auch die skalierten Funktionen

$$\tilde{\psi}^{(1)}(Q; E) = A^{(1)}(E) \psi^{(1)}(Q; E), \quad \tilde{\psi}^{(2)}(Q; E) = A^{(2)}(E) \psi^{(2)}(Q; E) \quad (5.21)$$

Lösungen des Randwertproblems (5.9) und (5.10), wobei sich die Wronski-Determinante (5.13) gemäß

$$\tilde{W}(E) = A^{(1)}(E) A^{(2)}(E) W(E) \quad (5.22)$$

verändert. Aufgrund einer geeigneten Skalierung (5.21), (5.22) kann man ohne Beschränkung der Allgemeinheit davon ausgehen, daß die einfachen Pole in der abschnittswisen Darstellung der Greenschen Funktion (5.12), das heißt die diskreten Energieeigenwerte  $E_n$ , mit den Nullstellen der Wronski-Determinante  $W(E)$  zusammenfallen:

$$W(E_n) = 0. \quad (5.23)$$

Berücksichtigt man die Definition (5.13) der Wronski-Determinante und (5.23), dann zeigt eine einfache Integration, daß die Funktionen  $\psi^{(1)}(Q; E_n)$  und  $\psi^{(2)}(Q; E_n)$  linear abhängig sind:

$$\psi^{(1)}(Q; E_n) = B_n \psi^{(2)}(Q; E_n). \quad (5.24)$$

Hierbei bezeichnen  $B_n$  Integrationskonstanten. Die diskreten Energieeigenfunktionen  $\psi_n(Q)$  ergeben sich nun über die Residuen (4.46) der abschnittswisen Darstellung der Greenschen Funktion (5.12) mit Hilfe von (4.51) und (5.24):

$$\psi_n(Q) = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2} \frac{B_n}{W'(E_n)}} \psi^{(2)}(Q; E_n). \quad (5.25)$$

Da die Vorschrift (4.46) garantiert, daß die diskreten Energieeigenfunktionen  $\psi_n(Q)$  gemäß (5.16) orthonormiert sind, lassen sich die Integrationskonstanten  $B_n$  im nachhinein berechnen:

$$B_n = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{W'(E_n)}{\int_a^b \psi^{(2)}(Q; E_n)^2 dQ}. \quad (5.26)$$

Führt man eine Skalierung der Funktionen  $\psi^{(1)}(Q; E)$  und  $\psi^{(2)}(Q; E)$  gemäß

$$\tilde{\psi}^{(1)}(Q; E) = -\frac{2m \int_a^b \psi^{(2)}(Q; E)^2 dQ}{\hbar^2 W'(E)} \psi^{(1)}(Q; E), \quad (5.27)$$

$$\tilde{\psi}^{(2)}(Q; E) = \frac{1}{\sqrt{\int_a^b \psi^{(2)}(Q; E)^2 dQ}} \psi^{(2)}(Q; E) \quad (5.28)$$

durch, dann lösen auch  $\tilde{\psi}^{(1)}(Q; E)$  und  $\tilde{\psi}^{(2)}(Q; E)$  das Randwertproblem (5.9), (5.10) und ihre Wronski-Determinante verschwindet analog zu (5.23) bei den diskreten Energieeigenwerten  $E_n$ . Aus (5.24)–(5.28) folgt aber zusätzlich, daß die Funktionen  $\tilde{\psi}^{(1)}(Q; E)$  und  $\tilde{\psi}^{(2)}(Q; E)$  im Falle  $E = E_n$  nicht nur linear abhängig sind, sondern sogar mit den diskreten Energieeigenfunktionen  $\psi_n(Q)$  zusammenfallen:

$$\psi_n(Q) = \tilde{\psi}^{(1)}(Q; E_n) = \tilde{\psi}^{(2)}(Q; E_n). \quad (5.29)$$

Dies bedeutet, daß zwei Funktionen  $\tilde{\psi}^{(1)}(Q; E)$  und  $\tilde{\psi}^{(2)}(Q; E)$  konstruiert worden sind, die bezüglich des Energieparameters  $E$  zwischen den diskreten Energieeigenfunktionen  $\psi_n(Q)$  interpolieren. Im folgenden wird dieser heuristische Grundgedanke der Interpolation weiterentwickelt.

### 5.2.2 Interpolationsfunktionen

Es wird nun die umgekehrte Situation betrachtet, daß die diskreten Spektraldaten des quantenmechanischen Systems als Lösungen des Eigenwertproblems (5.15) vorgegeben sind. Dabei kann man ohne Beschränkung der Allgemeinheit davon ausgehen, daß die diskreten Energieeigenwerte  $E_n$  monoton mit der Quantenzahl  $n$  anwachsen. Es stellt sich die Frage, ob zwischen den diskreten Energieeigenwerten  $E_n$  interpoliert werden kann. Hierzu muß man eine Funktion  $E_z$  suchen, die den diskreten Energieeigenwert  $E_n$  reproduziert, falls die kontinuierliche Variable  $z$  mit der Quantenzahl  $n$  zusammenfällt:

$$E_z \Big|_{z=n} = E_n. \quad (5.30)$$

Eine solche Interpolationsfunktion  $E_z$  ist bei einem analytisch lösbaeren quantenmechanischen System einfach zu konstruieren, da dann ein geschlossener Ausdruck angibt, wie die diskreten Energieeigenwerte  $E_n$  von der Quantenzahl  $n$  abhängen. Man hat nur die Quantenzahl  $n$  in diesem Ausdruck durch die kontinuierliche Variable  $z$  zu ersetzen. Im allgemeinen Fall ermöglichen verschiedene Interpolationsverfahren zumindest prinzipiell, die Interpolationsfunktion  $E_z$  als Laurent-Reihe in der kontinuierlichen Variablen  $z$  darzustellen.

Als nächstes betrachten wir das Problem, zwischen den diskreten Energieeigenfunktionen  $\psi_n(Q)$  zu interpolieren. Im Hinblick auf spätere Anwendungen ist es sogar erforderlich, zwei verschiedene Lösungen  $\psi_z^{(1)}(Q)$  und  $\psi_z^{(2)}(Q)$  dieses Interpolationsproblems einzuführen. Dabei wird verlangt, daß  $\psi_z^{(1)}(Q)$  und  $\psi_z^{(2)}(Q)$  nicht nur die Interpolationseigenschaft

$$\psi_z^{(1)}(Q)\Big|_{z=n} = \psi_n(Q)(-1)^n, \quad \psi_z^{(2)}(Q)\Big|_{z=n} = \psi_n(Q) \quad (5.31)$$

besitzen, sondern auch einem Randwertproblem genügen:

$$\{\hat{H} - E_z\} \psi_z^{(1)}(Q) = 0, \quad \psi_z^{(1)}(b) = 0, \quad (5.32)$$

$$\{\hat{H} - E_z\} \psi_z^{(2)}(Q) = 0, \quad \psi_z^{(2)}(a) = 0. \quad (5.33)$$

Die Existenz solcher Interpolationsfunktionen  $\psi_z^{(1)}(Q)$  und  $\psi_z^{(2)}(Q)$  läßt sich mit Hilfe der Funktionen (5.27), (5.28) zeigen, die das Randwertproblem (5.9), (5.10) erfüllen und die Interpolationseigenschaft (5.29) aufweisen:

$$\psi_z^{(1)}(Q) = \tilde{\psi}^{(1)}(Q; E_z) \cos \pi z, \quad \psi_z^{(2)}(Q) = \tilde{\psi}^{(2)}(Q; E_z). \quad (5.34)$$

In Abschnitt 5.2.4 wird anhand eines analytisch lösbaeren quantenmechanischen Systems exemplarisch gezeigt, wie sich solche Interpolationsfunktionen  $\psi_z^{(1)}(Q)$  und  $\psi_z^{(2)}(Q)$  konstruieren lassen.

Es ist darauf hinzuweisen, daß die eingeführten Interpolationsfunktionen  $E_z$ ,  $\psi_z^{(1)}(Q)$  und  $\psi_z^{(2)}(Q)$  nicht eindeutig sind. Beispielsweise besitzt mit  $E_z$  auch

$$\tilde{E}_z = E_z + A \sin \pi z \quad (5.35)$$

die Interpolationseigenschaft (5.30) und mit  $\psi_z^{(1)}(Q)$ ,  $\psi_z^{(2)}(Q)$  genügen auch

$$\tilde{\psi}_z^{(1)}(Q) = \psi_z^{(1)}(Q) [\cos \pi z]^{2m}, \quad \tilde{\psi}_z^{(2)}(Q) = \psi_z^{(2)}(Q) \{1 + B \sin \pi z\} \quad (5.36)$$

der Interpolationseigenschaft (5.31) und dem Randwertproblem (5.32), (5.33). Hierbei bezeichnen  $A$ ,  $B$  beliebige Konstanten und  $m$  stellt eine natürliche Zahl dar.

### 5.2.3 Aufsummation der Spektraldarstellung

Mit Hilfe der Interpolationsfunktionen  $E_z$ ,  $\psi_z^{(1)}(Q)$  und  $\psi_z^{(2)}(Q)$  ist man nun in der Lage, die Spektraldarstellung der Greenschen Funktion (5.20) explizit aufzusummieren und einen geschlossenen Ausdruck in Form der abschnittsweisen Darstellung (5.12) herzuleiten. Dabei kann man sich der Sommerfeld-Watson-Transformation [122, 127, 128] der Streutheorie [1, 7, 106] bedienen, die die Aufsummation von Reihen ermöglicht, bei denen der Summationsindex durch die Drehimpulsquantenzahl gegeben ist. In Anlehnung an die Arbeit von Kleinert und Mustapic [81] wird die Sommerfeld-Watson-Transformation auf die Spektraldarstellung der Greenschen Funktion (5.20) übertragen, bei der der Summationsindex eine beliebige Quantenzahl darstellt. Diese Verallgemeinerung ist insofern naheliegend, als sie sich einer elementaren Methode der Funktionentheorie bedient, eine Summe explizit auszuwerten [123, S. 188].

Zunächst muß man annehmen, daß die Funktion  $E_z$  zumindest im Interpolationsgebiet, d.h. entlang der positiven reellen Achse, streng monoton wachsend ist. Wenn diese Bedingung (C1) erfüllt ist, läßt sich die Umkehrfunktion  $z(E)$  gemäß

$$E = E_z(E) \quad (5.37)$$

eingeführen. Nach (5.30) und (5.37) interpoliert dann  $z(E)$  zwischen den Quantenzahlen  $n$ :

$$z(E_n) = n. \quad (5.38)$$

Anschließend definiert man mit Hilfe der Interpolationsfunktionen  $E_z$ ,  $z(E)$ ,  $\psi_z^{(1)}(Q)$  und  $\psi_z^{(2)}(Q)$  die Funktion

$$g(Q, Q_0; E) = \frac{i\hbar\pi}{\frac{\partial E_z}{\partial z} \sin \pi z} \left\{ \Theta(Q - Q_0) \psi_z^{(1)}(Q) \psi_z^{(2)}(Q_0) + \Theta(Q_0 - Q) \psi_z^{(1)}(Q_0) \psi_z^{(2)}(Q) \right\} \Big|_{z = z(E)} \quad (5.39)$$

und untersucht das komplexe Integral

$$I_N(Q, Q_0; E) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{c_N} \frac{g(Q, Q_0; \epsilon)}{\epsilon - E} d\epsilon. \quad (5.40)$$

Die Integrationskurve  $\mathcal{C}_N$  in der komplexen Ebene ist das Quadrat mit den Eckpunkten  $\epsilon_N(1+i)$ ,  $\epsilon_N(1-i)$ ,  $\epsilon_N(-1+i)$ ,  $\epsilon_N(-1-i)$ , wobei  $\epsilon_N$  durch

$$z(\epsilon_N) = N + \frac{1}{2} \quad (5.41)$$

festgelegt wird:

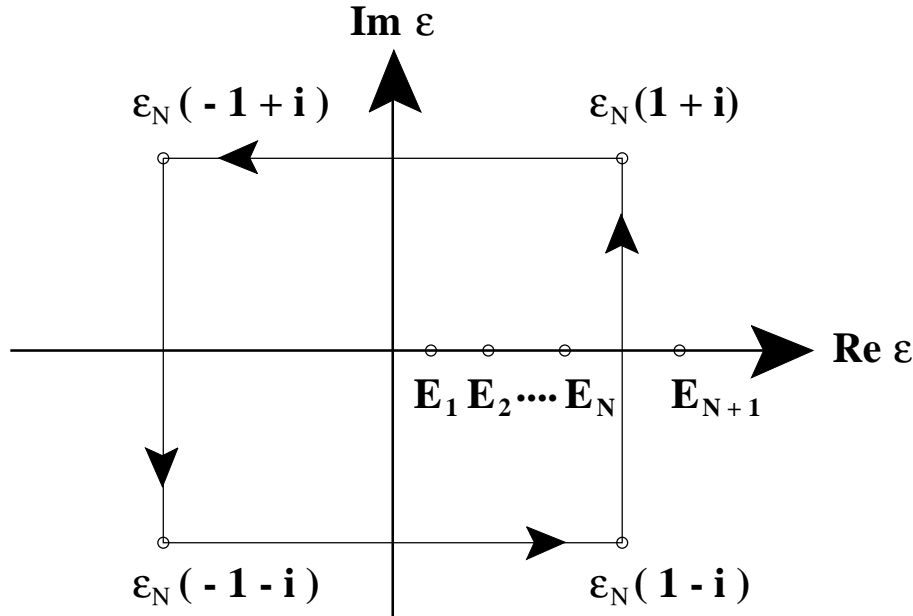


Abbildung 5.1: Definition der Integrationskurve  $\mathcal{C}_N$  in der komplexen Ebene.

Wenn die Funktion (5.39) der im folgenden mit (C2) bezeichneten Abschätzung

$$|g(Q, Q_0; \epsilon)| \leq \frac{M}{|\epsilon|^k} \quad (5.42)$$

entlang der Integrationskurve  $\mathcal{C}_N$  genügt und die Konstanten  $k > 0$ ,  $M$  unabhängig von  $N$  sind, dann gilt für das komplexe Integral (5.40):

$$|I_N(Q, Q_0; E)| \leq \frac{4ME_{N+1}}{\pi(E_N)^k(E_N - E)}. \quad (5.43)$$

Da in Abschnitt 5.2.2 ohne Beschränkung der Allgemeinheit angenommen wurde, daß die diskreten Energieeigenwerte  $E_n$  streng monoton mit der Quantenzahl  $n$  anwachsen, folgt aus der Abschätzung (5.43), daß das komplexe Integral (5.40) im Grenzübergang  $N \rightarrow \infty$  verschwindet:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} I_N(Q, Q_0; E) = 0. \quad (5.44)$$

Andererseits besagt der Residuensatz [8, S. 528], daß das komplexe Integral (5.40) im Grenzübergang  $N \rightarrow \infty$  in die Summe über alle Residuen des Integranden

übergeht. Während ein einfacher Pol des Integranden an der Stelle  $\epsilon = E$  vorliegt, stammen die restlichen einfachen Pole von der Funktion (5.39). Die Ableitung  $\partial E_z / \partial z$  mit  $z = z(E)$  kann keine Nullstelle bezüglich des Energieparameters  $E$  besitzen, da die Interpolationsfunktion  $E_z$  gemäß Bedingung (C1) streng monoton wachsend ist. Außerdem wird in Form einer zusätzlichen Bedingung (C3) gefordert, daß das Produkt  $\psi_z^{(1)}(Q)\psi_z^{(2)}(Q_0)$  mit  $z = z(E)$  keine einfachen Pole bezüglich des Energieparameters  $E$  aufweist. Die einfachen Pole der Funktion (5.39) werden dann ausschließlich von der Funktion  $\sin \pi z(E)$  erzeugt und stimmen wegen (5.38) mit den diskreten Energieeigenwerten  $E_n$  überein. Nach diesen Vorbereitungen kann man den Residuensatz [8, S. 528] auf das komplexe Integral (5.40) im Grenzübergang  $N \rightarrow \infty$  anwenden und die Residuen der jeweiligen einfachen Pole wegen (4.51) mit der Vorschrift

$$\operatorname{Res}_{z=z_0} f(z) = \frac{1}{\left. \frac{d}{dz} \frac{1}{f(z)} \right|_{z=z_0}} \quad (5.45)$$

auswerten. Dabei hat man die Identität

$$1 = \left. \frac{\partial E_z}{\partial z} \right|_{z=z(E)} z'(E) \quad (5.46)$$

zu beachten, die sich durch Differentiation von (5.37) nach dem Energieparameter  $E$  ergibt. Verwendet man die Interpolationseigenschaften (5.31), (5.38) und das Zwischenergebnis (5.44), so folgt schließlich

$$g(Q, Q_0; E) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(Q) \frac{i\hbar}{E - E_n} \psi_n^*(Q_0). \quad (5.47)$$

Auf der rechten Seite von (5.47) tritt die Spektraldarstellung der Greenschen Funktion (5.20) auf, so daß die Funktion  $g(Q, Q_0; E)$  mit der Greenschen Funktion  $G_c(Q, Q_0; E)$  übereinstimmen muß. Da andererseits die Interpolationsfunktionen  $\psi_z^{(1)}(Q)$ ,  $\psi_z^{(2)}(Q)$  das Randwertproblem (5.32), (5.33) lösen, so daß die Funktionen

$$\psi^{(1)}(Q; E) = \psi_{z(E)}^{(1)}(Q), \quad \psi^{(2)}(Q; E) = \psi_{z(E)}^{(2)}(Q) \quad (5.48)$$

wegen (5.37) dem Randwertproblem (5.9), (5.10) genügen, ist  $g(Q, Q_0; E)$  in (5.39) mit der abschnittswisen Darstellung der Greenschen Funktion (5.12) identisch. Hieraus läßt sich unmittelbar ablesen, daß die Funktionen (5.48) die Wronski-Determinante

$$W(E) = -\frac{2m}{\hbar^2} \left. \frac{\partial E_z}{\partial z} \sin \pi z \right|_{z=z(E)} \quad (5.49)$$

besitzen.



Die Überlegungen des Abschnitts zeigen, daß eine Verallgemeinerung der Sommerfeld-Watson-Transformation nur dann erlaubt, die Spektraldarstellung der Greenschen Funktion (5.20) explizit aufzusummieren, wenn die Interpolationsfunktionen  $E_z$ ,  $z(E)$ ,  $\psi_z^{(1)}(Q)$ ,  $\psi_z^{(2)}(Q)$  die Bedingungen (C1)–(C3) erfüllen. Ein allgemeiner und praktikabler Algorithmus, der die Konstruktion solcher Interpolationsfunktionen erlaubt, konnte in der Literatur nicht gefunden werden. Für den Fall eines analytisch lösbaren Systems kann man aber ausgehend von den diskreten Spektraldaten  $E_n$ ,  $\psi_n(Q)$  auf heuristischem Wege versuchen, Interpolationsfunktionen  $E_z$ ,  $z(E)$ ,  $\psi_z^{(1)}(Q)$ ,  $\psi_z^{(2)}(Q)$  zu konstruieren, so daß die Funktionen (5.48) gemäß (5.13) die Wronski-Determinante (5.49) besitzen. Wenn das möglich ist, kann man die abschnittsweise Darstellung der Greenschen Funktion in Form von (5.12) unmittelbar angeben.

### 5.2.4 Beispiel

Dieses heuristische Verfahren soll im folgenden exemplarisch anhand des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere (4.23) beschrieben werden (vgl. Abbildung 4.3). Nach [43, S. 119] führt das Eigenwertproblem (5.15) des dazugehörigen Hamilton-Operators (5.1) auf die diskreten Energieeigenwerte

$$E_n = \hbar\omega(2n + 1 + \nu) + C \quad (5.50)$$

und auf die orthonormierten diskreten Energieeigenfunktionen

$$\psi_n(Q) = \sqrt{\frac{2\Gamma(1+n)}{\Gamma(1+\nu+n)}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\nu+1} Q^{\nu+\frac{1}{2}} L_n^{(\nu)}\left(\frac{m\omega}{\hbar}Q^2\right) \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}Q^2\right\}. \quad (5.51)$$

Hierbei stellt  $\nu$  die Abkürzung (4.36) dar und  $L_n^{(\nu)}$  bezeichnen die verallgemeinerten Laguerre-Polynome. Da mit (5.50) ein geschlossener Ausdruck vorliegt, an dem sich ablesen läßt, wie die diskreten Energieeigenwerte  $E_n$  von der Quantenzahl  $n$  abhängen, kann die Interpolationsfunktion  $E_z$  unmittelbar angegeben werden. Man ersetzt die Quantenzahl  $n$  in (5.50) durch die kontinuierliche Variable  $z$ :

$$E_z = \hbar\omega(2z + 1 + \nu) + C. \quad (5.52)$$

Die entsprechende Umkehrfunktion  $z(E)$  lautet nach (5.37) und (5.52)

$$z(E) = \frac{E - C}{2\hbar\omega} - \frac{1}{2} - \frac{\nu}{2}, \quad (5.53)$$

so daß sich mit (5.49) die Wronski-Determinante

$$W(E) = \frac{4m\omega}{\pi\hbar} \sin \left\{ \pi \left( \frac{1}{2} + \frac{\nu}{2} - \frac{E-C}{2\hbar\omega} \right) \right\} \quad (5.54)$$

ergibt. Als nächstes sind die Funktionen  $\psi_z^{(1)}(Q)$  und  $\psi_z^{(2)}(Q)$  zu bestimmen, die gemäß (5.31) zwischen den diskreten Energieeigenfunktionen  $\psi_n(Q)$  interpolieren. Dabei hat man nach (5.32), (5.33) zu garantieren, daß die Interpolationsfunktionen  $\psi_z^{(1)}(Q)$  und  $\psi_z^{(2)}(Q)$  an je einem Rand des Definitionsbereiches  $I = (0, +\infty)$  verschwinden. Aus dem Ausdruck (5.51) für die diskreten Energieeigenfunktionen  $\psi_n(Q)$  sind die Interpolationsfunktionen  $\psi_z^{(1)}(Q)$  und  $\psi_z^{(2)}(Q)$  nicht unmittelbar ablesbar, da die verallgemeinerten Laguerre-Polynome  $L_n^{(\nu)}$  nur für positive ganze Zahlen  $n$  definiert sind. Die verallgemeinerten Laguerre-Polynome  $L_n^{(\nu)}$  lassen sich aber nach [48, (8.972.1)] und [48, (9.220.2)] durch die Whittaker-Funktionen  $M_{\lambda,\mu}$  ausdrücken, so daß (5.51) übergeht in

$$\psi_n(Q) = \sqrt{\frac{2\Gamma(1+\nu+n)}{\Gamma(1+n)\Gamma(1+\nu)^2}} \frac{1}{\sqrt{Q}} M_{\frac{1}{2}+\frac{\nu}{2}+n, \frac{\nu}{2}} \left( \frac{m\omega}{\hbar} Q^2 \right). \quad (5.55)$$

In (5.55) kann nun die Quantenzahl  $n$  durch die kontinuierliche Variable  $z$  ersetzt werden und man erhält für eine Interpolationsfunktion

$$\psi_z^{(2)}(Q) = \sqrt{\frac{2\Gamma(1+\nu+z)}{\Gamma(1+z)\Gamma(1+\nu)^2}} \frac{1}{\sqrt{Q}} M_{\frac{1}{2}+\frac{\nu}{2}+z, \frac{\nu}{2}} \left( \frac{m\omega}{\hbar} Q^2 \right). \quad (5.56)$$

Das asymptotische Verhalten der Whittaker-Funktion [48, (9.210)], [48, (9.220.2)]

$$M_{\lambda,\mu}(z) \sim z^{\mu+\frac{1}{2}}, \quad z \rightarrow 0 \quad (5.57)$$

besagt, daß die Funktion (5.56) wie in (5.33) gefordert am linken Rand des Definitionsbereiches  $I = (0, +\infty)$  verschwindet. Um auch die andere Funktion  $\psi_z^{(1)}(Q)$  angeben zu können, muß man nach (5.31) einen Vorfaktor  $(-1)^n$  von  $\psi_n(Q)$  abspalten. Hierzu führt man in (5.55) die Whittaker-Funktion  $W_{\lambda,\mu}$  ein [48, (9.220.4)] und wendet eine Eigenschaft der Gamma-Funktion [48, (8.331)] an:

$$\psi_n(Q) = (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\Gamma(1+n)\Gamma(1+\nu+n)}} \frac{1}{\sqrt{Q}} W_{\frac{1}{2}+\frac{\nu}{2}+n, \frac{\nu}{2}} \left( \frac{m\omega}{\hbar} Q^2 \right). \quad (5.58)$$

Läßt man in (5.58) den Vorfaktor  $(-1)^n$  weg und ersetzt man wieder die Quantenzahl  $n$  durch die kontinuierliche Variable  $z$ , so gewinnt man die Interpolationsfunktion

$$\psi_z^{(1)}(Q) = \sqrt{\frac{2}{\Gamma(1+z)\Gamma(1+\nu+z)}} \frac{1}{\sqrt{Q}} W_{\frac{1}{2}+\frac{\nu}{2}+z, \frac{\nu}{2}} \left( \frac{m\omega}{\hbar} Q^2 \right). \quad (5.59)$$

Das asymptotische Verhalten der Whittaker-Funktion [48, (9.227)]

$$W_{\lambda,\mu}(z) \sim z^\lambda \exp\left\{-\frac{z}{2}\right\}, \quad z \rightarrow +\infty \quad (5.60)$$

zeigt, daß die Funktion (5.59) entsprechend (5.32) am rechten Rand des Definitionsbereiches  $I = (0, +\infty)$  verschwindet. Außerdem kann man mit [10, S. 25] direkt nachprüfen, daß die durch (5.53), (5.56), (5.59) definierten Funktionen (5.48) gemäß (5.13) tatsächlich die Wronski-Determinante (5.54) besitzen. Mit Hilfe von (5.53), (5.54), (5.56), (5.59) kann dann die abschnittsweise Darstellung der Greenschen Funktion (5.12) auf den harmonischen Oszillator mit Zentrifugalbarriere (4.23) spezialisiert werden:

$$G_c(Q, Q_0; E) = \frac{1}{i\omega} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{\nu}{2} - \frac{E-C}{2\hbar\omega}\right)}{\Gamma(1 + \nu)} \frac{1}{\sqrt{Q Q_0}} \left[ \Theta(Q - Q_0) W_{\frac{E-C}{2\hbar\omega}, \frac{\nu}{2}}\left(\frac{m\omega}{\hbar} Q^2\right) \right. \\ \left. \cdot M_{\frac{E-C}{2\hbar\omega}, \frac{\nu}{2}}\left(\frac{m\omega}{\hbar} Q_0^2\right) + \Theta(Q_0 - Q) W_{\frac{E-C}{2\hbar\omega}, \frac{\nu}{2}}\left(\frac{m\omega}{\hbar} Q_0^2\right) M_{\frac{E-C}{2\hbar\omega}, \frac{\nu}{2}}\left(\frac{m\omega}{\hbar} Q^2\right) \right]. \quad (5.61)$$

## 5.3 Herleitung

Im vorangegangenen Abschnitt wurde die Beziehung zwischen zwei Darstellungen der Greenschen Funktion betrachtet. Die erzielten Ergebnisse werden nun dazu verwendet, das Problem anzugehen, das schon am Anfang dieses Kapitels geschildert wurde. Es wird untersucht, wie sich eine nichtintegrierte Raum-Zeit-Transformation zwischen zwei quantenmechanischen Systemen auf die jeweiligen Energieeigenwerte und Energieeigenfunktionen auswirkt. Dabei wird sich zeigen, daß eine eindeutige Abbildung zwischen den untersten diskreten Spektraldaten vorliegt. Außerdem wird eine konkrete Vorschrift angegeben, wie diskrete in kontinuierliche Energieeigenfunktionen konvertiert werden können.

### 5.3.1 Greensche Funktion des Endsystems

Der Einfachheit halber wird nur der Fall betrachtet, daß das Endsystem ein diskretes Spektrum besitzt. Interpoliert man gemäß Abschnitt 5.2 zwischen den diskreten Energieeigenwerten  $E_n^{(f)}(\lambda^{(f)})$  und den diskreten Energieeigenfunktionen  $\psi_n^{(f)}(Q; \lambda^{(f)})$ , so führt dies auf die Funktionen  $E_z^{(f)}(\lambda^{(f)})$ ,  $\psi_z^{(f,1)}(Q; \lambda^{(f)})$  und  $\psi_z^{(f,2)}(Q; \lambda^{(f)})$ . Im folgenden wird angenommen, daß sich die abschnittsweise Darstellung der Greenschen

Funktion des Endsystems  $G_c^{(f)}(Q, Q_0; E^{(f)}; \lambda^{(f)})$  nach (5.39) aus diesen Interpolationsfunktionen zusammensetzt:

$$G_c^{(f)}(Q, Q_0; E^{(f)}; \lambda^{(f)}) = \frac{i\hbar\pi}{\frac{\partial E_z^{(f)}(\lambda^{(f)})}{\partial z} \sin \pi z} \left\{ \Theta(Q - Q_0) \psi_z^{(f,1)}(Q; \lambda^{(f)}) \psi_z^{(f,2)}(Q_0; \lambda^{(f)}) \right. \\ \left. + \Theta(Q_0 - Q) \psi_z^{(f,1)}(Q_0; \lambda^{(f)}) \psi_z^{(f,2)}(Q; \lambda^{(f)}) \right\} \Big|_{z = z(E^{(f)}; \lambda^{(f)})}. \quad (5.62)$$

Die Umkehrfunktion  $z(E^{(f)}; \lambda^{(f)})$  der Interpolationsfunktion  $E_z^{(f)}(\lambda^{(f)})$  ist dabei entsprechend (5.37) definiert durch

$$E^{(f)} = E_z^{(f)}(\lambda^{(f)}) \Big|_{z = z(E^{(f)}; \lambda^{(f)})}. \quad (5.63)$$

### 5.3.2 Greensche Funktion des Ausgangssystems

Kennt man die Greensche Funktion des Endsystems  $G_c^{(f)}(Q, Q_0; E^{(f)}; \lambda^{(f)})$ , so gewinnt man die des Ausgangssystems  $G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)})$  nach der Transformationsformel (4.20). Dementsprechend geht die abschnittsweise Darstellung der Greenschen Funktion des Endsystems (5.62) in die des Ausgangssystems über:

$$G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)}) = \sqrt{q'(Q(q; \lambda^{(i)}); \lambda^{(i)}) q'(Q(q_0; \lambda^{(i)}); \lambda^{(i)})} \\ \cdot \frac{i\hbar\pi}{\frac{\partial E_z^{(f)}(\lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))}{\partial z} \sin \pi z} \left\{ \Theta(q - q_0) \psi_z^{(f,1)}(Q(q; \lambda^{(i)}); \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})) \right. \\ \cdot \psi_z^{(f,2)}(Q(q_0; \lambda^{(i)}); \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})) + \Theta(q_0 - q) \psi_z^{(f,1)}(Q(q_0; \lambda^{(i)}); \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})) \\ \left. \cdot \psi_z^{(f,2)}(Q(q; \lambda^{(i)}); \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})) \right\} \Big|_{z = z(0; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))}. \quad (5.64)$$

Die Bestimmungsgleichung (5.63) der Umkehrfunktion  $z(E^{(f)}; \lambda^{(f)})$  spezialisiert sich hierbei auf

$$0 = E_z^{(f)}(\lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})) \Big|_{z = z(0; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))}. \quad (5.65)$$

Betrachtet man die analytische Fortsetzung von (5.64) bezüglich des Energieparameters  $E^{(i)}$ , so lassen sich die diskreten und die kontinuierlichen Spektraldaten des Ausgangssystems rekonstruieren (vgl. Abschnitt 4.4.2).

### 5.3.3 Abbildung diskreter Energieeigenwerte

Um die diskreten Energieeigenwerte des Ausgangssystems  $E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  zu bestimmen, muß man die einfachen Pole in der abschnittswisen Darstellung der Greenschen Funktion (5.64) bezüglich des Energieparameters  $E^{(i)}$  identifizieren. Mit Hilfe ähnlicher Annahmen wie in Abschnitt 5.2.3 können wir ablesen, daß diese einfachen Pole mit den einfachen Nullstellen der Funktion  $\sin \pi z(0; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))$  übereinstimmen. Dies bedeutet, daß die Funktion  $z(0; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))$  in eine Quantenzahl  $n$  übergeht, wenn man den Energieparameter  $E^{(i)}$  durch einen diskreten Energieeigenwert  $E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  ersetzt:

$$z\left(0; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E_n^{(i)}(\lambda^{(i)}))\right) = n. \quad (5.66)$$

Nach (5.65) und (5.66) sind die diskreten Energieeigenwerte  $E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  mit den einfachen Nullstellen der Funktionen  $E_n^{(f)}(\lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))$  identisch. Da aber vorausgesetzt wird, daß eine nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation invertierbar ist, müssen die jeweiligen Rollen des Ausgangs- und des Endsystems prinzipiell austauschbar sein. Hieraus folgt, daß die Funktionen  $E_n^{(f)}(\lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))$  höchstens einfache Nullstellen besitzen. Demnach sind die diskreten Energieeigenwerte des Ausgangssystems  $E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  für jede Quantenzahl  $n$  als die eindeutigen Lösungen der impliziten Gleichungen

$$E_n^{(f)}\left(\lambda_{\hbar}^{(f)}\left(\lambda^{(i)}, E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})\right)\right) = 0 \quad (5.67)$$

festgelegt. Diese Vorschrift stellt eine eindeutige Abbildung zwischen den diskreten Energieeigenwerten des Ausgangs- und des Endsystems dar.

Es ist darauf hinzuweisen, daß dieses Resultat (5.67) in der Arbeit [137] durch einen Vergleich von nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen im klassischen, semiklassischen und quantenmechanischen Bereich abgeleitet wurde. Dabei wurde gezeigt, daß die Abbildung zwischen diskreten Energieeigenwerten (5.67) mit Hilfe einer entsprechenden Abbildung zwischen klassischen Orbits anschaulich interpretiert werden kann.

### 5.3.4 Abbildung diskreter Energieeigenfunktionen

Die Residuen der einfachen Pole in der abschnittswisen Darstellung der Greenschen Funktion (5.64) führen gemäß (4.46) auf die diskreten Energieeigenfunktionen des

Ausgangssystem  $\psi_n^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$ . Wertet man diese Residuen mit Hilfe der Vorschrift (5.45) aus, so hat man die Identität (5.66) und die Interpolationseigenschaften (5.31) der Funktionen  $\psi_z^{(f,1)}(Q; \lambda^{(f)})$ ,  $\psi_z^{(f,2)}(Q; \lambda^{(f)})$  zu beachten. Es zeigt sich, daß die diskreten Energieeigenfunktionen des Ausgangssystems  $\psi_n^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  direkt proportional zu denen des Endsystems  $\psi_n^{(f)}(Q; \lambda^{(f)})$  sind, wobei die Raumkoordinate  $Q$  und der Parametersatz  $\lambda^{(f)}$  gemäß (4.3) und (4.15) zu substituieren sind:

$$\begin{aligned} \psi_n^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) &= N_n^{(i)}(\lambda^{(i)}) \sqrt{q'(Q(q; \lambda^{(i)}); \lambda^{(i)})} \\ &\cdot \psi_n^{(f)}(Q(q; \lambda^{(i)}); \lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E_n^{(i)}(\lambda^{(i)}))) . \end{aligned} \quad (5.68)$$

Außerdem erhält man für die Normierungskonstanten  $N_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  den Ausdruck

$$N_n^{(i)}(\lambda^{(i)}) = \frac{1}{\sqrt{\left. \frac{\partial E_z^{(f)}(\lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})))}{\partial z} \right|_{z=n} \left. \frac{\partial z(0; \lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})}{\partial E^{(i)}} \right|_{E^{(i)}=E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})}}}} . \quad (5.69)$$

Differenziert man andererseits die Bestimmungsgleichung (5.65) der Umkehrfunktion  $z(0; \lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))$  bezüglich des Energieparameters  $E^{(i)}$ , so ergibt sich

$$\begin{aligned} &\left. \frac{\partial E_z^{(f)}(\lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))}{\partial z} \right|_{z=z(0; \lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))} \frac{\partial z(0; \lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))}{\partial E^{(i)}} \\ &+ \left. \frac{\partial E_z^{(f)}(\lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))}{\partial E^{(i)}} \right|_{z=z(0; \lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))} = 0 . \end{aligned} \quad (5.70)$$

Wertet man diese Identität an den Stellen  $E^{(i)} = E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  mit Hilfe von (5.66) aus, so läßt sich der Ausdruck (5.69) für die Normierungskonstanten  $N_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  vereinfachen. Man erhält das interessante Ergebnis, daß eine enge Beziehung zwischen den Normierungskonstanten  $N_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  und der Abbildung diskreter Energieeigenwerte (5.67) besteht. Die Normierungskonstanten  $N_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  hängen nämlich explizit von der Ableitung der Funktionen  $E_n^{(f)}(\lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))$  an deren Nullstellen  $E^{(i)} = E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  ab:

$$N_n^{(i)}(\lambda^{(i)}) = \frac{1}{\sqrt{\left. -\frac{\partial E_n^{(f)}(\lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)}))}{\partial E^{(i)}} \right|_{E^{(i)}=E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})}}} . \quad (5.71)$$

Die Transformationsformeln (5.68) und (5.71) stellen eine eindeutige Abbildung zwischen den diskreten Energieeigenfunktionen des Ausgangs- und des Endsystems dar. Sind die diskreten Energieeigenfunktionen des Endsystems  $\psi_n^{(f)}(Q; \lambda^{(f)})$  bezüglich der Raumkoordinate  $Q$  normiert, dann garantieren (5.68) und (5.71), daß auch

die diskreten Energieeigenfunktionen des Ausgangssystems  $\psi_n^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  bezüglich der Raumkoordinate  $q$  normiert sind.

Es ist anzumerken, daß die Resultate (5.68) und (5.71) erstmals von Junker [73] durch Transformation der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung abgeleitet wurden. Später wurden sie von De, Dutt, Sukhatme [17] im Rahmen der supersymmetrischen Quantenmechanik [74, 135] auf forminvariante Potentiale angewandt. Eine andere Herleitung von (5.68) und (5.71), die ausschließlich auf der Spektraldarstellung der Greenschen Funktion beruht, wurde in [102, 103] angegeben.

### 5.3.5 Abbildung kontinuierlicher Spektraldaten

Beim Spektrum des Ausgangssystems hat man zwei Fälle zu unterscheiden. Wenn das Potential  $V^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  entsprechend (5.2) an den Rändern seines Definitionsbereiches  $I^{(i)} = (a^{(i)}, b^{(i)})$  unbeschränkt anwächst, besitzt das Ausgangssystem nur diskrete Spektraldaten. In diesem Fall gewinnt man die diskreten Energieeigenwerte und die diskreten Energieeigenfunktionen des Ausgangssystems mit Hilfe der eindeutigen Abbildungen (5.67), (5.68), (5.71) aus den jeweiligen diskreten Spektraldaten des Endsystems. Wächst dagegen das Potential  $V^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  mindestens an einem seiner Ränder nicht unbeschränkt, so besitzt das Ausgangssystem nur eine endliche Zahl  $N^{(i)}(\lambda^{(i)})$  diskreter Spektraldaten. Das hat zur Folge, daß nur die untersten diskreten Spektraldaten des Endsystems gemäß (5.67), (5.68), (5.71) auf das Ausgangssystem abgebildet werden können. In Abschnitt 5.4 wird anhand eines konkreten Beispiels gezeigt, wie die Abbildung diskreter Spektraldaten für Quantenzahlen  $n > N^{(i)}(\lambda^{(i)})$  zusammenbrechen kann.

Neben der endlichen Zahl  $N^{(i)}(\lambda^{(i)})$  diskreter Spektraldaten weist das Ausgangssystem aber auch kontinuierliche Spektraldaten auf. Die kontinuierlichen Energieeigenwerte existieren in einem Intervall  $[E^{(i)}(\lambda^{(i)}), +\infty)$ , das die Definitionslücke der Greenschen Funktion  $G_c^{(i)}(q, q_0; E^{(i)}; \lambda^{(i)})$  bezüglich des Energieparameters  $E^{(i)}$  darstellt. Die abschnittsweise Darstellung der Greenschen Funktion (5.64) besagt, daß die kontinuierlichen Energieeigenwerte des Ausgangssystems  $[E^{(i)}(\lambda^{(i)}), +\infty)$  mit der Definitionslücke der Interpolationsfunktionen des Endsystems  $z(0; \lambda^{(f)})$ ,  $\psi_z^{(f,1)}(Q; \lambda^{(f)})$ ,  $\psi_z^{(f,2)}(Q; \lambda^{(f)})$  mit  $\lambda^{(f)} = \lambda_h^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})$  übereinstimmen. Da beim Endsystem ein rein diskretes Spektrum vorliegen soll, besitzen die analytischen

Fortsetzungen dieser Funktionen bei einem kontinuierlichen Energieeigenwert  $E \in [E^{(i)}(\lambda^{(i)}), +\infty)$  die Eigenschaften:

$$z^* \left( 0; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E + i\epsilon) \right) = z \left( 0; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E - i\epsilon) \right), \quad (5.72)$$

$$\psi_z^{(f,1)*} \left( Q; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E + i\epsilon) \right) = \psi_z^{(f,1)} \left( Q; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E - i\epsilon) \right), \quad (5.73)$$

$$\psi_z^{(f,2)*} \left( Q; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E + i\epsilon) \right) = \psi_z^{(f,2)} \left( Q; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E - i\epsilon) \right). \quad (5.74)$$

Die kontinuierlichen Energieeigenfunktionen des Ausgangssystems  $\psi_E^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  ergeben sich dadurch, daß man die abschnittsweise Darstellung der Greenschen Funktion (5.64) unter Berücksichtigung von (5.72)–(5.74) in die Vorschrift (4.47) einsetzt. Dabei kann man ausnützen, daß die linke Seite der entstehenden Gleichung unter dem Austausch der Raumkoordinaten  $q$  und  $q_0$  invariant bleibt. Beschränkt man sich auf der rechten Seite beispielsweise auf den Fall  $q > q_0$ , dann gewinnt man eine konkrete Formel, die die diskreten Energieeigenfunktionen des Endsystems  $\psi_n^{(f)}(Q; \lambda^{(f)})$  in die Projektoren des Ausgangssystems

$$\begin{aligned} \psi_E^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) \psi_E^{(i)*}(q_0; \lambda^{(i)}) &= \sqrt{q'(Q(q; \lambda^{(i)}); \lambda^{(i)}) q'(Q(q_0; \lambda^{(i)}); \lambda^{(i)})} \\ &\cdot (-1) \operatorname{Im} \lim_{\epsilon \downarrow 0} \left\{ \frac{\psi_z^{(f,1)} \left( Q(q; \lambda^{(i)}); \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E + i\epsilon) \right)}{\frac{\partial E_z^{(f)} \left( \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E + i\epsilon) \right)}{\partial z}} \right. \\ &\cdot \left. \frac{\psi_z^{(f,2)} \left( Q(q_0; \lambda^{(i)}); \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E + i\epsilon) \right)}{\sin \pi z} \right|_{z = z(0; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E + i\epsilon))} \end{aligned} \quad (5.75)$$

konvertiert. Die Bezeichnung  $\operatorname{Im}$  besagt, daß vom restlichen Ausdruck der Imaginärteil zu bilden ist.

Die Transformationsformel (5.75) ist folgendermaßen zu verwenden. Wenn das Potential  $V^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  nur an einem Rand des Definitionsbereiches  $I^{(i)} = (a^{(i)}, b^{(i)})$  unbeschränkt anwächst, ist der Eigenraum zum kontinuierlichen Energieeigenwert  $E \in [E^{(i)}(\lambda^{(i)}), +\infty)$  eindimensional. Die Auswertung von (5.75) führt dann direkt zu den kontinuierlichen Energieeigenfunktionen  $\psi_E^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$ , die automatisch analog zu (4.57) normiert sind. Ein Beispiel hierzu wird in Abschnitt 5.4 vorgestellt. Wächst dagegen das Potential  $V^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  an keinem der beiden Ränder des Definitionsbereiches  $I^{(i)} = (a^{(i)}, b^{(i)})$  unbeschränkt an, ist der Eigenraum zum kontinuierlichen Energieeigenwert  $E \in [E^{(i)}(\lambda^{(i)}), +\infty)$  zweidimensional und daher entartet. In diesem Fall erlaubt die Transformationsformel (5.75) lediglich,



den Projektor dieses entarteten Eigenraumes  $\psi_E^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) \psi_E^{(i)*}(q_0; \lambda^{(i)})$  zu bestimmen. Anschließend verbleibt die Aufgabe, in diesem zweidimensionalen Eigenraum Basisfunktionen  $\psi_E^{(i,1)}(q; \lambda^{(i)})$  und  $\psi_E^{(i,2)}(q; \lambda^{(i)})$  mit der Zerlegung

$$\psi_E^{(i)}(q; \lambda^{(i)}) \psi_E^{(i)*}(q_0; \lambda^{(i)}) = \sum_{j=1}^2 \psi_E^{(i,j)}(q; \lambda^{(i)}) \psi_E^{(i,j)*}(q_0; \lambda^{(i)}) \quad (5.76)$$

zu finden, die analog zu (4.57) orthonormiert sind. Ein Beispiel für diesen Fall stellt die nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation zwischen dem Rosen-Morse- und dem Pöschl-Teller-Potential dar [81].

## 5.4 Beispiel

Die im vorangegangenen Abschnitt abgeleiteten Abbildungen von Spektraldaten werden nun anhand des nichttrivialen Beispiels von Kapitel 4 diskutiert. Es wird gezeigt, wie eine nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation die diskreten Spektraldaten des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere (4.23) sowohl auf die diskreten als auch auf die kontinuierlichen Spektraldaten des Morse-Potentials (4.21) abbildet (vgl. Abbildung 4.3). Dabei kann auf die vorbereitenden Überlegungen von Abschnitt 5.2.4 zurückgegriffen werden.

### 5.4.1 Diskrete Spektraldaten des Morse-Potentials

Bei der Abbildung diskreter Energieeigenwerte wird davon ausgegangen, daß die diskreten Energieeigenwerte  $E_n^{(f)}(\lambda^{(f)})$  des Endsystems, d.h. des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere (4.23), bekannt sind. Nach (4.36) und (5.50) lauten sie explizit

$$E_n^{(f)}(\lambda^{(f)}) = \hbar\omega \left( 2n + 1 + \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{8m}{\hbar^2} g} \right) + C. \quad (5.77)$$

In Kapitel 4 wurde gezeigt, daß die nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation (4.4), (4.7) und (4.25) zwischen dem harmonischen Oszillator mit Zentrifugalbarriere (4.23) und dem Morse-Potential (4.21) vermittelt, wobei die Beziehung zwischen den Parametersätzen (4.22) und (4.24) durch (4.32)–(4.34) gegeben ist. Setzt man diese Beziehung in (5.77) ein, so erhält man die Funktion

$$E_n^{(f)}(\lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})) = \sqrt{\frac{2\hbar^2 V_0}{m\alpha^2}} \left( 2n + 1 + \sqrt{-\frac{E^{(i)}}{\hbar^2 \alpha^2}} - \sqrt{\frac{\gamma^2 V_0}{\hbar^2 \alpha^2}} \right), \quad (5.78)$$

die für die Abbildung diskreter Spektraldaten von zentraler Bedeutung ist. Nach (5.67) führen die Nullstellen von (5.78) auf eine implizite Bestimmungsgleichung für die diskreten Energieeigenwerte  $E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  des Ausgangssystems, d.h. des Morse-Potentials (4.21):

$$\sqrt{\frac{2\hbar^2 V_0}{m\alpha^2}} \left( 2n + 1 + \sqrt{-\frac{E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}} - \sqrt{\frac{\gamma^2 V_0}{\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m}}} \right) = 0. \quad (5.79)$$

Löst man (5.79) nach  $E_n^{(i)}(\lambda^{(i)})$  auf, dann ergibt sich tatsächlich das richtige Resultat (4.49). Da Wurzelfunktionen positiv sind, gewinnt man aus (5.79) aber auch die einschränkende Bedingung (4.50) für die Quantenzahl  $n$ . Es gibt demnach eine größte Quantenzahl  $N^{(i)}(\lambda^{(i)})$ , so daß die Abbildung diskreter Energieeigenwerte für die Quantenzahlen  $n > N^{(i)}(\lambda^{(i)})$  zusammenbricht. Dies bedeutet, daß das Morse-Potential (4.21) nur endlich viele diskrete Energieeigenwerte besitzt.

Auch bei der Abbildung diskreter Energieeigenfunktionen ist davon auszugehen, daß die diskreten Energieeigenfunktionen des Endsystems  $\psi_n^{(f)}(Q; \lambda^{(f)})$  bekannt sind. Beim harmonischen Oszillator mit Zentrifugalbarriere (4.23) sind sie durch (4.36) und (5.51) gegeben. Die diskreten Energieeigenfunktionen des Ausgangssystems  $\psi_n^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  lassen sich dann mit Hilfe der Transformationsformeln (5.68) und (5.71) berechnen. Beachtet man die Langer-Transformation (4.25), die Beziehung (4.32)–(4.34) zwischen den Parametersätzen, die Funktion (5.78) und ihre Nullstellen (4.49), so ergeben sich wie erwartet die diskreten Energieeigenfunktionen (4.39), (4.52) des Morse-Potentials (4.21).

### 5.4.2 Kontinuierliche Spektraldaten des Morse-Potentials

Da das Potential des Ausgangssystems, das Morse-Potential (4.21), am rechten Rand seines Definitionsbereiches  $I^{(i)} = (-\infty, +\infty)$  nicht unbeschränkt anwächst, besitzt es zusätzlich zur endlichen Zahl  $N^{(i)}(\lambda^{(i)})$  diskreter Spektraldaten auch kontinuierliche Spektraldaten. Nach Abschnitt 5.3.5 lassen sie sich mit Hilfe der Interpolationsfunktionen des Endsystems  $z(0; \lambda^{(f)})$ ,  $\psi_z^{(f,1)}(Q; \lambda^{(f)})$ ,  $\psi_z^{(f,2)}(Q; \lambda^{(f)})$  und der Beziehung  $\lambda^{(f)} = \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})$  zwischen den Parametersätzen berechnen. Im Falle des harmonischen Oszillators mit Zentrifugalbarriere (4.23) erhält man mit (4.32)–(4.34), (4.36), (4.39), (5.53) (5.56) und (5.59)

$$z(0; \lambda_{\hbar}^{(f)}(\lambda^{(i)}, E^{(i)})) = \frac{\beta}{2} - \frac{1}{2} - \frac{k}{2}, \quad (5.80)$$

$$\psi_z^{(f,1)}\left(Q; \lambda_{\hbar}^{(f)}\left(\lambda^{(i)}, E^{(i)}\right)\right) = \sqrt{\frac{2}{\Gamma(1+z)\Gamma(1+k+z)Q}} W_{\frac{1}{2}+\frac{k}{2}+z, \frac{k}{2}}\left(\frac{\beta}{\gamma}Q^2\right), \quad (5.81)$$

$$\psi_z^{(f,2)}\left(Q; \lambda_{\hbar}^{(f)}\left(\lambda^{(i)}, E^{(i)}\right)\right) = \sqrt{\frac{2\Gamma(1+k+z)}{\Gamma(1+z)\Gamma(1+k)^2Q}} M_{\frac{1}{2}+\frac{k}{2}+z, \frac{k}{2}}\left(\frac{\beta}{\gamma}Q^2\right), \quad (5.82)$$

wobei die Abhängigkeit vom Energieparameter  $E^{(i)}$  ausschließlich von der dimensionslosen Abkürzung (4.40) herrührt. Wegen der in (4.40) auftretenden Wurzelfunktion besitzen die Funktionen (5.80)–(5.82) eine Definitionslücke bezüglich des Energieparameters  $E^{(i)}$  entlang der positiven reellen Achse, so daß das Morse-Potential (4.21) kontinuierliche Energieeigenwerte im Intervall  $[0, +\infty)$  besitzt. Außerdem genügen die analytischen Fortsetzungen der Funktionen (5.80)–(5.82) bei einem kontinuierlichen Energieeigenwert  $E \in [0, +\infty)$  gemäß (4.40), (4.54) den Eigenschaften (5.72)–(5.74). Deshalb lassen sich die kontinuierlichen Energieeigenfunktionen  $\psi_E^{(i)}(q; \lambda^{(i)})$  des Morse-Potentials (4.21) aus der Transformationsformel (5.75) berechnen, wobei die Langer-Transformation (4.25), die dimensionslosen Abkürzungen (4.39) und (4.55) sowie die Interpolationsfunktion (5.52) mit (4.32) zu verwenden sind. Beachtet man die beiden Eigenschaften [48, (8.331)] und [48, (8.334.3)] der Gamma-Funktion, dann erhält man tatsächlich das richtige Ergebnis (4.56).

*Bei der Berechnung von irgendwelchen  
Größen als Energie, Frequenz usw. dürfen  
nur Beziehungen zwischen prinzipiell  
kontrollierbaren Größen vorkommen.*  
W. Heisenberg (1901 – 1976)

## Kapitel 6

# Zeitunabhängige Störungstheorie

Entwickelt man nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen um die Identität, so eröffnen sie einen neuen Zugang zur zeitunabhängigen Störungstheorie, indem sie das ungestörte System auf das gestörte System abbilden [138]. Im Unterschied zur konventionellen Störungstheorie stellt sich heraus, daß die gestörten Energieeigenwerte auch ohne Kenntnis der ungestörten Energieeigenfunktionen berechnet werden können.

Abschnitt 6.1 führt zunächst in die Problemstellung ein, diejenige nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation zu bestimmen, die einen ungestörten Energieeigenwert in den entsprechenden gestörten Energieeigenwert abbildet. Entwickelt man die gesuchte nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation in eine Potenzreihe nach dem vorgegebenen Kleinheitsparameter, dann führt dies nach Abschnitt 6.2 in jeder Ordnung der Störungstheorie zu einer inhomogenen linearen gewöhnlichen Differentialgleichung dritter Ordnung. In Abschnitt 6.3 wird mit Hilfe des Fredholm-schen Alternativsatzes aufgezeigt, welche Beziehung zwischen dem hier vorgestellten Zugang zur zeitunabhängigen Störungstheorie über nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen und der konventionellen Störungstheorie besteht. In Abschnitt 6.4 wird dann am Beispiel eines gestörten harmonischen Oszillators ein systematisches Verfahren zur Lösung der Differentialgleichung vorgestellt, das auf einer zusätzlichen Entwicklung der gesuchten nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformation nach einem geeigneten Funktionensystem beruht. Eine Erweiterung dieses Verfahrens führt in Abschnitt 6.5 zu einer explizit lösbaren Rekursionsformel, die die Energieverschiebungen des harmonischen Oszillators für unterschiedliche Störpotentiale miteinander verbindet.

## 6.1 Problemstellung

Nach Kapitel 5 führen nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen zu Abbildungen zwischen den diskreten Spektraldaten eindimensionaler quantenmechanischer Systeme. Dabei sind die Zeittransformationen durch

$$\frac{dt}{ds} = q_n'(Q)^2 \quad (6.1)$$

festgelegt und die Raumtransformationen

$$q = q_n(Q) \quad (6.2)$$

vermitteln zwischen dem Ausgangspotential  $V^{(i)}(q)$  mit den Energieeigenwerten  $E_n^{(i)}$  und dem Endpotential  $V^{(f)}(Q)$  mit den Energieeigenwerten  $E_n^{(f)}$ :

$$\begin{aligned} V^{(f)}(Q) - E_n^{(f)} &= q_n'(Q)^2 \left\{ V^{(i)}(q_n(Q)) - E_n^{(i)} \right\} \\ &+ \frac{\hbar^2}{m} \left\{ \frac{3}{8} \frac{q_n''(Q)^2}{q_n'(Q)^2} - \frac{1}{4} \frac{q_n'''(Q)}{q_n'(Q)} \right\}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Im Rahmen der zeitunabhängigen Störungstheorie [6, S. 256], [37, S. 394] stellt sich die grundsätzliche Frage, wie diejenige nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation (6.1) und (6.2) bestimmt werden kann, die einen ungestörten Energieeigenwert in den entsprechenden gestörten Energieeigenwert abbildet. Zur Untersuchung dieser Problemstellung wird im folgenden das Ausgangspotential  $V^{(i)}(q)$  mit dem ungestörten Potential  $V_0(q)$  identifiziert

$$V^{(i)}(q) = V_0(q), \quad (6.4)$$

so daß der Energieeigenwert  $E_n^{(i)}$  mit dem als bekannt vorausgesetzten ungestörten Energieeigenwert  $E_{0,n}$  übereinstimmt:

$$E_n^{(i)} = E_{0,n}. \quad (6.5)$$

Dann ist diejenige Raumtransformation (6.2) zu bestimmen, die das ungestörte System (6.4) und (6.5) gemäß (6.3) in das gestörte Potential

$$V^{(f)}(Q) = V_0(Q) + \lambda V_1(Q) \quad (6.6)$$

mit dem gesuchten gestörten Energieeigenwert

$$E_n^{(f)} = E_n \quad (6.7)$$

abbildet. Hierbei bezeichnet  $V_1(Q)$  das Störpotential und der Kleinheitsparameter  $\lambda$  kontrolliert die Abweichung des gestörten Potentials (6.6) vom ungestörten Potential (6.4).

## 6.2 Potenzreihenentwicklung

Für den Fall, daß der Kleinheitsparameter  $\lambda$  verschwindet, folgt aus (6.3)–(6.7), daß sich die Raumtransformation (6.2) auf die identische Transformation

$$q_n(Q) = Q \quad (6.8)$$

reduziert und daß sich der Energieeigenwert nicht verändert:

$$E_n = E_{0,n}. \quad (6.9)$$

Bei kleinen Werten von  $\lambda$  ist zu erwarten, daß die gesuchten Größen  $q_n(Q)$  und  $E_n$  nur geringfügig von (6.8) und (6.9) abweichen. Deshalb werden  $q_n(Q)$  und  $E_n$  wie folgt nach Potenzen des vorgegebenen Kleinheitsparameters  $\lambda$  entwickelt:

$$q_n(Q) = Q + \lambda q_{1,n}(Q) + \lambda^2 q_{2,n}(Q) + \dots, \quad (6.10)$$

$$E_n = E_{0,n} + \lambda E_{1,n} + \lambda^2 E_{2,n} + \dots \quad (6.11)$$

Setzt man (6.4)–(6.7) und die beiden Ansätze (6.10) und (6.11) in (6.3) ein, so lassen sich die Entwicklungskoeffizienten  $q_{k,n}(Q)$  und  $E_{k,n}$  mit der Methode der sukzessiven Approximation [6, S. 259] bestimmen. Hierbei erhält man in der  $k$ ten Ordnung der Störungstheorie eine inhomogene lineare gewöhnliche Differentialgleichung dritter Ordnung

$$\hat{L}_n(Q) q_{k,n}(Q) = V_{k,n}(Q) - E_{k,n}, \quad (6.12)$$

wobei der lineare Differentialoperator  $\hat{L}_n(Q)$  unabhängig von der Ordnung  $k$  gegeben ist durch

$$\hat{L}_n(Q) \bullet = -\frac{\hbar^2}{4m} \frac{d^3}{dQ^3} \bullet + 2 \{V_0(Q) - E_{0,n}\} \frac{d}{dQ} \bullet + V_0'(Q) \bullet. \quad (6.13)$$

Es zeigt sich, daß die Inhomogenität  $V_{k,n}(Q)$  in (6.12) durch die Entwicklungskoeffizienten  $q_{1,n}(Q), \dots, q_{k-1,n}(Q)$  der vorhergehenden Ordnungen, durch den ungestörten Energieeigenwert  $E_{0,n}$  sowie durch das ungestörte Potential  $V_0(Q)$  und das Störpotential  $V_1(Q)$  festgelegt sind. Beispielsweise gewinnt man in der ersten Ordnung

$$V_{1,n}(Q) = V_1(Q) \quad (6.14)$$

und in der zweiten Ordnung

$$\begin{aligned} V_{2,n}(Q) = & -q_{1,n}'(Q)^2 \{V_0(Q) - E_{0,n}\} - 2q_{1,n}'(Q) q_{1,n}(Q) V_0'(Q) \\ & - \frac{1}{2} q_{1,n}(Q)^2 V_0''(Q) - \frac{3\hbar^2}{8m} q_{1,n}''(Q)^2 - \frac{\hbar^2}{4m} q_{1,n}'''(Q) q_{1,n}'(Q). \end{aligned} \quad (6.15)$$

### 6.3 Fredholmscher Alternativsatz

Um den Fredholmschen Alternativsatz [9, S. 46] zur Lösung der Differentialgleichung (6.12) heranziehen zu können, ist zu untersuchen, ob der Differentialoperator  $\hat{L}_n(Q)$  eine nichttriviale Eigenfunktion  $a_n(Q)$  zum Eigenwert  $\lambda_n = 0$  besitzt:

$$\hat{L}_n(Q) a_n(Q) = 0. \quad (6.16)$$

Aufgrund der Definition (6.13) des Differentialoperators  $\hat{L}_n(Q)$  nimmt (6.16) die folgende Form an:

$$-\frac{\hbar^2}{4m} a_n'''(Q) + 2 \{V_0(Q) - E_{0,n}\} a_n'(Q) + V_0'(Q) a_n(Q) = 0. \quad (6.17)$$

Hieraus sieht man, daß eine nichttriviale Eigenfunktion  $a_n(Q)$  des Differentialoperators  $\hat{L}_n(Q)$  zum Eigenwert  $\lambda_n = 0$  durch

$$a_n(Q) = \psi_n(Q)^2 \quad (6.18)$$

gegeben ist, wobei  $\psi_n(Q)$  der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung des ungestörten Systems genügt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_n''(Q) + V_0(Q) \psi_n(Q) = E_{0,n} \psi_n(Q). \quad (6.19)$$

Der Fredholmsche Alternativsatz [9, S. 46] besagt nun, daß die Differentialgleichung (6.12) lösbar ist, wenn das Skalarprodukt der Eigenfunktion  $a_n^\dagger(Q)$  des adjungierten Differentialoperators  $\hat{L}_n^\dagger(Q)$  zum Eigenwert  $\lambda_n^\dagger = \lambda_n = 0$

$$\hat{L}_n^\dagger(Q) a_n^\dagger(Q) = 0 \quad (6.20)$$

mit der Inhomogenität von (6.12) verschwindet. Das bedeutet, daß die Energieverschiebung  $E_{k,n}$  in der  $k$ ten Ordnung der Störungstheorie durch den Erwartungswert der Inhomogenität  $V_{k,n}(Q)$  bezüglich der Eigenfunktion  $a_n^\dagger(Q)$  festgelegt ist:

$$E_{k,n} = \frac{\int a_n^\dagger(Q) V_{k,n}(Q) dQ}{\int a_n^\dagger(Q) dQ}. \quad (6.21)$$

Dabei erstrecken sich beide Integrationen über den zugrunde liegenden Definitionsbereich. Aufgrund der Antihermiteizität des Differentialoperators  $\hat{L}_n(Q)$  in (6.13)

$$\hat{L}_n(Q) + \hat{L}_n^\dagger(Q) = 0 \quad (6.22)$$

kann man die Eigenfunktion  $a_n^\dagger(Q)$  mit der Eigenfunktion  $a_n(Q)$  identifizieren:

$$a_n^\dagger(Q) = a_n(Q). \quad (6.23)$$

Aus (6.14), (6.18), (6.19), (6.21) und (6.23) liest man ab, daß der hier vorgestellte Zugang zur zeitunabhängigen Störungstheorie über die Methode der nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen in der ersten Ordnung mit dem bekannten Ergebnis der konventionellen Störungstheorie [6, S. 256], [37, S. 394] übereinstimmt.

## 6.4 Gestörter harmonischer Oszillator

Ein systematisches Verfahren, die Differentialgleichung (6.12) zu lösen, besteht darin, sowohl die Inhomogenität  $V_{k,n}(Q)$  als auch die Raumtransformation  $q_{k,n}(Q)$  nach einem geeigneten vollständigen Funktionensystem zu entwickeln. Die Differentialgleichung (6.12) führt dann aufgrund der Vollständigkeit dieses Funktionensystems zu einem inhomogenen linearen Gleichungssystem, aus dem die Entwicklungskoeffizienten der Raumtransformation  $q_{k,n}(Q)$  und die gesuchte Energieverschiebung  $E_{k,n}$  in Abhängigkeit der Entwicklungskoeffizienten der Inhomogenität  $V_{k,n}(Q)$  bestimmt werden können. Dieses Verfahren wird nun am illustrativen Beispiel eines gestörten harmonischen Oszillators näher erläutert. Hierzu wird untersucht, wie ein Energieeigenwert

$$E_{0,n} = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (6.24)$$

des harmonischen Oszillators

$$V_0(Q) = \frac{m}{2} \omega^2 Q^2 \quad (6.25)$$

durch das anharmonische Störpotential

$$V_1(Q) = Q^4 \quad (6.26)$$

in erster Ordnung und in zweiter Ordnung des Kleinheitsparameters  $\lambda$  verschoben wird.

### 6.4.1 Störungstheorie erster Ordnung

Nach (6.14) und (6.26) kann man in der ersten Ordnung der Störungstheorie das Potential  $V_{1,n}(Q)$  als eine Potenzreihenentwicklung auffassen, bei der nur ein einziger



Entwicklungskoeffizient nicht verschwindet. Deshalb wird auch für  $q_{1,n}(Q)$  eine Potenzreihenentwicklung durchgeführt, wobei sich herausstellt, daß nur zwei Terme relevant sind:

$$q_{1,n}(Q) = q_{1,n}^1 Q + q_{1,n}^3 Q^3. \quad (6.27)$$

Aus (6.12)–(6.14) und (6.25)–(6.27) resultiert dann ein inhomogenes lineares Gleichungssystem, das die Entwicklungskoeffizienten  $q_{1,n}^1$  und  $q_{1,n}^3$  sowie die gesuchte Energie  $E_{1,n}$  festlegt:

$$q_{1,n}^3 = \frac{1}{4m\omega^2}, \quad (6.28)$$

$$q_{1,n}^1 = \frac{3}{4m^2\omega^4} E_{0,n}, \quad (6.29)$$

$$E_{1,n} = \frac{3}{2m^2\omega^4} (E_{0,n})^2 + \frac{3\hbar^2}{8m^2\omega^2}. \quad (6.30)$$

Setzt man (6.24) in (6.30) ein, dann erhält man für die Enenergieverschiebung des Energieeigenwertes  $E_{0,n}$  des harmonischen Oszillators (6.25) durch das Störpotential (6.26) in Störungstheorie erster Ordnung [43, S. 102]

$$E_{1,n} = \frac{3\hbar^2}{4m^2\omega^2} (2n^2 + 2n + 1). \quad (6.31)$$

## 6.4.2 Störungstheorie zweiter Ordnung

Mit den Ergebnissen (6.27)–(6.29) in der ersten Ordnung der Störungstheorie kann nun nach (6.15) die Größe  $V_{2,n}(Q)$  berechnet werden, die in der zweiten Ordnung der Störungstheorie als Inhomogenität der Differentialgleichung (6.12) auftritt. Es zeigt sich, daß man für  $V_{2,n}(Q)$  eine Potenzreihenentwicklung erhält, die nur aus den vier Termen

$$V_{2,n}(Q) = V_{2,n}^0 + V_{2,n}^2 Q^2 + V_{2,n}^4 Q^4 + V_{2,n}^6 Q^6 \quad (6.32)$$

besteht. Die auftretenden Entwicklungskoeffizienten sind dabei gegeben durch

$$V_{2,n}^6 = -\frac{11}{16m\omega^2}, \quad (6.33)$$

$$V_{2,n}^4 = -\frac{27}{16m^2\omega^4} E_{0,n}, \quad (6.34)$$

$$V_{2,n}^2 = -\frac{9}{16m^3\omega^6} (E_{0,n})^2 - \frac{9\hbar^2}{8m^3\omega^4}, \quad (6.35)$$

$$V_{2,n}^0 = \frac{9}{16m^4\omega^8} (E_{0,n})^3 - \frac{9\hbar^2}{32m^4\omega^6} E_{0,n}. \quad (6.36)$$

Deshalb wird auch für die Lösung  $q_{2,n}(Q)$  der Differentialgleichung (6.12) eine Potenzreihenentwicklung durchgeführt, wobei man sich auf die Terme

$$q_{2,n}(Q) = q_{2,n}^1 Q + q_{2,n}^3 Q^3 + q_{2,n}^5 Q^5 \quad (6.37)$$

beschränken kann. Aus (6.12), (6.13), (6.25), (6.32) und (6.37) ergibt sich dann ein inhomogenes lineares Gleichungssystem, aus dem sowohl die drei Entwicklungskoeffizienten von (6.37)

$$q_{2,n}^5 = \frac{1}{6m\omega^2} V_{2,n}^6, \quad (6.38)$$

$$q_{2,n}^3 = \frac{1}{4m\omega^2} V_{2,n}^4 + \frac{5E_{0,n}}{12m^2\omega^4} V_{2,n}^6, \quad (6.39)$$

$$q_{2,n}^1 = \frac{1}{2m\omega^2} V_{2,n}^2 + \frac{3E_{0,n}}{4m^2\omega^4} V_{2,n}^4 + \left\{ \frac{5(E_{0,n})^2}{4m^3\omega^6} + \frac{5\hbar^2}{4m^3\omega^4} \right\} V_{2,n}^6, \quad (6.40)$$

als auch die Energie

$$E_{2,n} = V_{2,n}^0 + \frac{E_{0,n}}{m\omega^2} V_{2,n}^2 + \left\{ \frac{3(E_{0,n})^2}{2m^2\omega^4} + \frac{3\hbar^2}{8m^2\omega^2} \right\} V_{2,n}^4 + \left\{ \frac{5(E_{0,n})^3}{2m^3\omega^6} + \frac{25\hbar^2 E_{0,n}}{8m^3\omega^4} \right\} V_{2,n}^6 \quad (6.41)$$

in Abhängigkeit der Entwicklungskoeffizienten von (6.32) bestimmt werden können. Aus (6.33)–(6.36) und (6.41) gewinnt man ferner eine explizite Beziehung zwischen  $E_{2,n}$  und  $E_{0,n}$ :

$$E_{2,n} = -\frac{17}{4m^4\omega^8} (E_{0,n})^3 - \frac{67\hbar^2}{16m^4\omega^6} E_{0,n}. \quad (6.42)$$

Demnach lautet die Energieverschiebung eines Energieeigenwertes (6.24) des harmonischen Oszillators (6.25) durch das Störpotential (6.26) in der zweiten Ordnung der Störungstheorie [43, S. 102]:

$$E_{2,n} = -\frac{\hbar^3}{8m^4\omega^5} (34n^3 + 51n^2 + 59n + 21). \quad (6.43)$$

## 6.5 Rekursionsformel

In diesem Abschnitt werden weitergehende nützliche Techniken vorgestellt, die man zur Lösung der Differentialgleichung (6.12) verwenden kann. Hierzu wird in Anlehnung an das soeben diskutierte Beispiel des gestörten harmonischen Oszillators untersucht, wie ein Energieeigenwert (6.24) des harmonischen Oszillators (6.25) durch die Störpotentiale

$$V_1(Q) = Q^{2N} \quad (6.44)$$

verschoben wird. Es zeigt sich, daß für die jeweiligen Energieverschiebungen

$$E_{1,n} = E_{1,n}^N \quad (6.45)$$

in der ersten Ordnung der Störungstheorie eine Rekursionsformel

$$E_{1,n}^N = f(E_{1,n}^{N-1}, E_{1,n}^{N-2}) \quad ; N \geq 2 \quad (6.46)$$

ableitbar ist, die zusammen mit den Startwerten  $E_{1,n}^0$  und  $E_{1,n}^1$  explizit gelöst werden kann.

### 6.5.1 Gleichungssystem

Setzt man in der ersten Ordnung der Störungstheorie die Raumtransformation an als

$$q_{1,n}(Q) = \sum_{l=1}^N q_{1,n}^{N,l} Q^{2l-1}, \quad (6.47)$$

dann folgt aus (6.12)–(6.14), (6.25), (6.44), (6.45) und (6.47) ein inhomogenes lineares Gleichungssystem für die Entwicklungskoeffizienten  $q_{1,n}^{N,l}$ . Führt man einen Vektor mit den Komponenten

$$y_l^N = \begin{cases} 0 & ; l = 0, \dots, N-1 \\ 1 & ; l = N \end{cases} \quad (6.48)$$

für die vorgegebene Inhomogenität und einen Vektor mit den Komponenten

$$x_l^N = \begin{cases} E_{1,n}^N & ; l = 0 \\ q_{1,n}^{N,l} & ; l = 1, \dots, N \end{cases} \quad (6.49)$$

für die gesuchten Größen ein, dann lautet dieses Gleichungssystem

$$y_l^N = \sum_{\nu=1}^N A_{l,\nu} x_\nu^N \quad ; l = 0, \dots, N, \quad (6.50)$$

wobei die nichtverschwindenden Elemente der Matrix gegeben sind durch

$$A_{0,0} = 1, \quad (6.51)$$

$$A_{l,l} = 2m\omega^2 l \quad ; l = 1, \dots, N, \quad (6.52)$$

$$A_{l,l+1} = -2E_{0,n}(2l+1) \quad ; l = 0, \dots, N-1, \quad (6.53)$$

$$A_{l,l+2} = -\frac{\hbar^2}{4m}(2l+1)(2l+2)(2l+3) \quad ; l = 0, \dots, N-2. \quad (6.54)$$

Da es sich hierbei um eine Bandmatrix handelt, bei der nichtverschwindende Einträge nur in der Hauptdiagonalen und in den ersten beiden oberen Nebendiagonalen vorliegen, kann man das Gleichungssystem (6.50) gemäß

$$y_l^N = A_{l,l} x_l^N + A_{l,l+1} x_{l+1}^N + A_{l,l+2} x_{l+2}^N \quad ; l = 0, \dots, N \quad (6.55)$$

iterativ von  $l = N$  bis  $l = 0$  lösen, wobei die Startwerte

$$x_{N+1}^N = x_{N+2}^N = 0 \quad (6.56)$$

zu verwenden sind. Hierdurch erhält man beispielsweise

$$x_N^N = \frac{1}{A_{N,N}}, \quad (6.57)$$

$$x_{N-1}^N = -\frac{A_{N-1,N}}{A_{N-1,N-1} A_{N,N}}; \quad N \geq 2. \quad (6.58)$$

Die eigentlich interessierende Energieverschiebung  $E_{1,n}^N$  ergibt sich wegen (6.49) erst am Ende dieses Iterationsprozesses.

## 6.5.2 Herleitung der Rekursionsformel

Bisher wurde lediglich das Problem eines einzelnen Störpotentials (6.44) mit einem festen Index  $N$  betrachtet. Nun soll der Frage nachgegangen werden, ob die Probleme verschiedener Störpotentiale mit unterschiedlichen Indizes  $N$  zueinander in Beziehung gesetzt werden können. Hierzu wird zunächst untersucht, ob aus dem bekannten Lösungsvektor  $x_l^{N-1}$  des Gleichungssystems zum Index  $N-1$  der Lösungsvektor  $x_l^N$  des Gleichungssystems zum Index  $N$  in (6.55) konstruiert werden kann. Wählt man beispielsweise den Ansatz

$$\tilde{x}_l^N = \begin{cases} x_l^{N-1} & ; l = 0, \dots, N-1 \\ 1 & ; l = N \end{cases}, \quad (6.59)$$

dann folgt aus (6.55)–(6.59) als Inhomogenität

$$\tilde{y}_l^N = \begin{cases} 0 & ; l = 0, \dots, N-3 \\ A_{N-2,N} & ; l = N-2 \\ A_{N-1,N} + 1 & ; l = N-1 \\ A_{N,N} & ; l = N \end{cases}. \quad (6.60)$$

Da (6.60) nicht mit (6.48) übereinstimmt, handelt es sich bei (6.59) noch nicht um den gesuchten Lösungsvektor  $x_l^N$  des Gleichungssystems zum Index  $N$  in (6.55).

Aufgrund der Linearität des Gleichungssystems (6.55) läßt sich dessen Lösungsvektor  $x_l^N$  aus (6.59) und (6.60) unmittelbar ablesen. Man erhält unter Beachtung von (6.56)

$$x_l^N = \frac{1}{A_{N,N}} \left\{ \tilde{x}_l^N - (A_{N-1,N} + 1) x_l^{N-1} - A_{N-2,N} x_l^{N-2} \right\}; \quad l = 0, \dots, N. \quad (6.61)$$

Für  $l = 0$  folgt dann aus (6.61) unter Beachtung der Definitionen (6.49) und (6.59) eine Rekursionsformel für die Energieverschiebungen  $E_{1,n}^N$

$$A_{N,N} E_{1,n}^N + A_{N-1,N} E_{1,n}^{N-1} + A_{N-2,N} E_{1,n}^{N-2} = 0 \quad ; \quad N \geq 2, \quad (6.62)$$

die mit Hilfe der Matrixelemente (6.51)–(6.54) übergeht in

$$E_{1,n}^N = \frac{(2N-1)E_{0,n}}{Nm\omega^2} E_{1,n}^{N-1} + \frac{(2N-3)(2N-2)(2N-1)\hbar^2}{8Nm^2\omega^2} E_{1,n}^{N-2}; \quad N \geq 2. \quad (6.63)$$

Untersucht man das Gleichungssystem (6.55) mit den Matrixelementen (6.51)–(6.54) speziell für  $N = 0$  und  $N = 1$ , dann erhält man außerdem die Startwerte dieser Rekursionsformel:

$$E_{1,n}^0 = 1, \quad E_{1,n}^1 = \frac{E_{0,n}}{m\omega^2}. \quad (6.64)$$

Die Bedeutung dieser Rekursionsformel besteht darin, daß sie einen direkten Zugang zu den interessierenden Energieverschiebungen  $E_{1,n}^N$  erlaubt und daher das langwierige Lösen der inhomogenen linearen Gleichungssysteme (6.55) überflüssig macht. Aus (6.63) und (6.64) läßt sich beispielsweise für  $N = 2$  unmittelbar das frühere Ergebnis (6.30) reproduzieren

$$E_{1,n}^2 = \frac{3}{2m^2\omega^4} (E_{0,n})^2 + \frac{3\hbar^2}{8m^2\omega^2} \quad (6.65)$$

und für  $N = 3$  ergibt sich sofort

$$E_{1,n}^3 = \frac{5}{2m^3\omega^6} (E_{0,n})^3 + \frac{25\hbar^2}{8m^3\omega^4} E_{0,n}. \quad (6.66)$$

### 6.5.3 Lösung der Rekursionsformel

Durch den Ansatz

$$E_{1,n}^N = \left( \frac{\hbar}{4m\omega} \right)^N \frac{(2N)!}{N!} U_n^N \quad (6.67)$$

und die Energieeigenwerte (6.24) des harmonischen Oszillators gewinnt man aus der komplizierten Rekursionsformel (6.63) für die Energieverschiebungen  $E_{1,n}^N$  eine vereinfachte Rekursionsformel für die dimensionslosen Größen  $U_n^N$

$$N U_n^N - (2n + 1) U_n^{N-1} - (N - 1) U_n^{N-2} = 0; \quad N \geq 2, \quad (6.68)$$

und die Startwerte (6.64) gehen über in

$$U_n^0 = 1, \quad U_n^1 = 2n + 1. \quad (6.69)$$

Eine Standardmethode, solche Rekursionsformeln explizit zu lösen, beruht darauf, die erzeugende Funktion [8, S. 649]

$$u_n(z) = \sum_{N=0}^{\infty} U_n^N z^N \quad (6.70)$$

einzuführen. Multipliziert man nämlich die Rekursionsformel (6.68) mit  $z^{N-1}$  und summiert man von  $N = 2$  bis  $N = \infty$ , dann erhält man unter Beachtung der Startwerte (6.69) und der Definition (6.70) eine homogene lineare gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung für die erzeugende Funktion  $u_n(z)$ :

$$(1 - z^2) u_n'(z) - (z + 2n + 1) u_n(z) = 0. \quad (6.71)$$

Deren Lösung und die aus (6.69) und (6.70) abzulesende Anfangsbedingung

$$u_n(0) = 1 \quad (6.72)$$

bestimmen die erzeugende Funktion  $u_n(z)$  zu

$$u_n(z) = \frac{(1+z)^n}{(1-z)^{n+1}}. \quad (6.73)$$

Aus der Kenntnis der erzeugenden Funktion  $u_n(z)$  lassen sich dann die gesuchten Größen  $U_n^N$  unmittelbar durch Differentiationen berechnen:

$$U_n^N = \frac{1}{N!} \left. \frac{d^N u_n(z)}{dz^N} \right|_{z=0}. \quad (6.74)$$

Die Anwendung der Leibnizschen Produktregel [8, S. 269] führt auf eine Summe über Trinomialkoeffizienten [8, S. 105]:

$$U_n^N = \sum_{l=0}^{\text{Min}(N,n)} \binom{N+n-l}{l, N-l, n-l}. \quad (6.75)$$

Damit stellt sich heraus, daß die durch den geschickten Ansatz (6.67) eingeführten dimensionslosen Größen  $U_n^N$  bezüglich beider Indizes  $N$  und  $n$  symmetrisch sind:

$$U_n^N = U_N^n. \quad (6.76)$$

Die explizite Auswertung von (6.75) für  $N = 0$  und  $N = 1$  führt auf die Startwerte (6.69). Für  $N = 2$  und  $N = 3$  erhält man entsprechend

$$U_n^2 = 2n^2 + 2n + 1, \quad (6.77)$$

$$U_n^3 = \frac{1}{3} (4n^3 + 6n^2 + 8n + 3), \quad (6.78)$$

so daß wegen (6.24) und (6.67) die obigen Ergebnisse (6.65) und (6.66) reproduziert werden.

*Tatsächlich ist alles, was wir wissen,  
eine Approximation, weil wir wissen,  
daß uns noch nicht alle Gesetze bekannt sind.*

R.P. Feynman (1918 – 1988)

# Kapitel 7

## Ausblick

Das Ziel der vorliegenden Arbeit bestand darin, auf die physikalische Bedeutung nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen aufmerksam zu machen, die sowohl eine Krümmung als auch eine Torsion der Raum-Zeit-Struktur bewirken. Im theoretischen Teil wurde gezeigt, daß nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen die unterschiedlichen Standardformulierungen der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik invariant lassen. Die resultierenden Transformationsvorschriften für die jeweiligen physikalischen Größen wurden am Beispiel einer nichtrelativistischen Punktmasse abgeleitet, die sich auf einer Riemann-Mannigfaltigkeit unter dem Einfluß äußerer Potentiale bewegt. Im anwendungsorientierten Teil wurden in einer Raumdimension die Eigenschaften der Abbildungen untersucht, die sich zwischen verschiedenen klassischen oder quantenmechanischen Systemen ergeben. Dabei wurden neue Verfahren entwickelt, mit denen sich Trajektorien und kausale Propagatoren berechnen lassen. Außerdem wurde gezeigt, daß nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen bei quantenmechanischen Spektraldaten sowohl zu einer eindeutigen Abbildung zwischen diskreten Spektraldaten als auch zu einer Konvertierung von diskreten in kontinuierlichen Spektraldaten führen können. Abschließend wurde eine Entwicklung nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen um die Identität durchgeführt, die einen neuen Zugang zur zeitunabhängigen Störungstheorie eröffnet.

Es sollte aber auch darauf hingewiesen werden, daß die vorliegende Arbeit der Einfachheit halber darauf beschränkt worden ist, eine eng umrissene Problemstellung zu behandeln. Würde man versuchen, die zahlreichen Selbstbeschränkungen aufzuheben, so würde dies zu einigen interessanten Fragestellungen für künftige Studien führen:



- Mehrere Raumdimensionen:

Die Anwendungen der nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen wurden in den Kapiteln 4 bis 6 nur in einer Raumdimension behandelt. Es steht deshalb noch aus, die in Kapitel 2 und 3 abgeleiteten Resultate anhand eines mehrdimensionalen Beispiels zu überprüfen. Erweitert man die Überlegungen zur Abbildung von Spektraldaten oder zur zeitunabhängigen Störungstheorie auf mehrere Raumdimensionen, so hat man insbesondere zu untersuchen, wie sich eine eventuelle Entartung des Spektrums auswirkt.

- Verallgemeinerte unitäre Transformationen:

Im Anhang A wird die Diracsche Formulierung der klassischen Mechanik entwickelt, bei der die Raum- und die Zeitkoordinaten formal gleichberechtigt behandelt werden. Dies ermöglicht unter anderem, die nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen als verallgemeinerte kanonische Transformationen zu identifizieren. In künftigen Arbeiten wäre zu untersuchen, inwieweit entsprechende Überlegungen auch in der Quantenmechanik durchführbar sind. Dabei stellt sich insbesondere die Frage, ob die nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen als verallgemeinerte unitäre Transformationen aufgefaßt werden können.

- Klassisches Chaos und Quantenchaos:

Während eine chaotische Dynamik in der klassischen Mechanik durch divergierende Trajektorien charakterisiert werden kann [29, 117], ist zur Zeit noch umstritten, wie das Konzept einer chaotischen Dynamik auf die Quantenmechanik übertragen werden kann [14, 55, 56]. Nach Gutzwiller [55] hat sich bei vielen chaotischen Systemen die semiklassische Näherung des kausalen Propagators bewährt, die den Einfluß der klassischen periodischen Orbits auf quantenmechanische Observablen quantitativ beschreibt [81, Kap. 4]. Um die Konsequenzen nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen für die Abbildung zwischen zwei klassisch oder zwei quantenmechanisch chaotischen Systemen zu untersuchen, müßte man zunächst die semiklassische Näherung  $\hbar \rightarrow 0$  in der Transformation des kausalen Propagators (3.172) durchführen.

Anschließend könnte man das Ergebnis im Rahmen der Theorie der klassischen periodischen Orbits interpretieren und auf ein konkretes physikalisches System anwenden. Aufgrund der umfangreichen Arbeiten von Hasegawa, Robnik, Wunner [62] und Friedrich, Wintgen [44, 132] bietet es sich hierzu an, das dreidimensionale Wasserstoffatom im homogenen Magnetfeld zu untersuchen. Durch eine Kustaanheimo-Stiefel-Transformation [88] oder durch eine Duru-Kleinert-Transformation [25, 26] kann dieses chaotische System auf vier gekoppelte harmonische Oszillatoren abgebildet werden.

- Gruppentheorie:

Ein zentrales Anliegen der vorliegenden Arbeit bestand darin, den üblichen Kovarianzbegriff [42, S. 113], [70, S. 158], [129, S. 91], der nur integrable Raum-Zeit-Transformationen berücksichtigt, systematisch auf nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen zu erweitern. Durch den Nachweis, daß die nichtrelativistischen Standardformulierungen der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik unter den nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen (1.19), (1.20) invariant sind, konnte gezeigt werden, daß beide physikalische Theorien eine tiefliegende Symmetrie besitzen. Es ist allerdings nicht gelungen, eine präzise gruppentheoretische Charakterisierung dieser Symmetrie anzugeben.

- Nichtintegrale Raumtransformationen:

Da in der vorliegenden Arbeit nur integrable Raumtransformationen betrachtet worden sind, lassen sich die erzielten Ergebnisse nicht auf die bekanntesten nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen von Kustaanheimo und Stiefel [88] oder von Duru und Kleinert [25, 26] anwenden. Um eine umfassende Theorie aller bekannten nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen zu entwickeln, muß man die vorliegenden Untersuchungen auch auf nichtintegrale Raumtransformationen ausdehnen. Dies erfordert unter anderem, daß man die bestehenden Formulierungen der klassischen Mechanik [5, 40, 41, 61, 84, 109, 131] und der Quantenmechanik [79], [82, Kap. 10] für Räume mit Krümmung und Torsion weiter ausarbeitet. Es ist zu erwarten, daß sich hieraus auch neue Impulse für die allgemein relativistische Einstein-Cartan-Theorie [63, 64, 65, 80, 115] und für die Kontinuumstheorie der Defekte [80, 85, 86] ergeben.

- Explizit zeitabhängige nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen:

Gemäß [98, 99, 125] und der darauf aufbauenden Arbeit [52] lassen sich auch nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen durchführen, die explizit von der Zeit abhängen. Diese Verallgemeinerung beinhaltet in einer Raumdimension als Spezialfall die Abbildung des harmonischen Oszillators auf das freie Teilchen, die zuvor schon auf anderem Wege gefunden wurde [11, 72]. Eine Untersuchung explizit zeitabhängiger nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in mehreren Raumdimensionen steht allerdings noch aus. Nach [25, 26, 88, 98, 99] sollte es beispielsweise möglich sein, das dreidimensionale Wasserstoffatom direkt auf das freie Teilchen in vier Raumdimensionen abzubilden.

- Relativistische klassische Mechanik und relativistische Quantenmechanik:

Die vorliegende Arbeit hat sich darauf beschränkt, die nichtrelativistische klassischen Mechanik und die nichtrelativistische Quantenmechanik auf ihre Forminvarianz unter nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen zu untersuchen. Deshalb weicht beispielsweise das Transformationsverhalten der räumlichen Metrik in (2.78) und (3.169) von der eines Tensors zweiter Stufe ab. Um manifest kovariante Transformationsvorschriften für alle physikalischen Größen zu erhalten, wird es notwendig sein, entsprechende Invarianzuntersuchungen auch in der relativistischen klassischen Mechanik und in der relativistischen Quantenmechanik anzustellen. Dabei kann man auf den Arbeiten von Kleinert [83] sowie Kaye und Inomata [75] aufbauen, die zur Regularisierung des dreidimensionalen Wasserstoffatoms in der relativistischen Quantenmechanik für Spin-0- und Spin-1/2-Teilchen die Kustaanheimo-Stiefel-Transformation [88] und die Biedenharn-Transformation [4] verwenden.

- Homogene Markov-Prozesse:

Grundsätzlich stellt sich die Frage, ob auch andere physikalische Theorien unter nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen forminvariant sind. In [97] wurde bei der Diskussion eines eindimensionalen Beispiels vermutet, daß nichtintegrale Raum-Zeit-Transformationen zu Abbildungen zwischen stochastischen Propagatoren von homogenen Markov-Prozessen [57, 58, 59, 107] führen. Die damaligen Überlegungen beruhten im wesentlichen darauf,

daß stochastische und quantenmechanische Systeme in einer Raumdimension mathematisch zueinander äquivalent sind. Bisher ist es allerdings nicht gelungen, diese Vermutung in einer oder in mehreren Raumdimensionen zu beweisen.

- Mathematisch rigorose Untersuchung:

Es ist auch wünschenswert, eine mathematisch rigorose Untersuchung nichtintegrierbarer Raum-Zeit-Transformationen vorzunehmen. Erste Ergebnisse wurden dadurch erzielt [38, 39], daß die maßtheoretischen Methoden der stochastischen Analysis auf das Feynmansche Pfadintegral übertragen worden sind [108, 136]. Weitergehende Resultate würden sich aber ergeben, wenn man das Feynmansche Pfadintegral als Wirkung einer Hida-Distribution auffaßt [13, 67, 94] und im Rahmen dieser „White Noise Analysis“ nichtintegrierbare Raum-Zeit-Transformationen durchführt. Beispielsweise könnte man mit Hilfe nichtintegrierbarer Raum-Zeit-Transformationen eine Äquivalenzrelation auf der Menge aller quantenmechanischer Systeme einführen und versuchen, die dadurch entstehenden Äquivalenzklassen im mathematisch strengen Sinne zu charakterisieren.



*Von Stund an sollen Raum für sich  
und Zeit für sich völlig zu Schatten  
herabsinken und nur noch eine Art Union  
der beiden soll Selbständigkeit bewahren.*

H. Minkowski (1864 – 1909)

## Anhang A

# Diracsche Formulierung der klassischen Mechanik

In der gewöhnlichen Formulierung der klassischen Mechanik sieht man die Zeit im Sinne Newtons als gleichförmig fließende, absolute physikalische Größe an (vgl. Zitat auf Seite 17), die zur Parametrisierung der Trajektorie im zugrunde liegenden Konfigurationsraum verwendet werden kann. Damit weist man der Zeitkoordinate  $t$  im Vergleich zu den anderen Raumkoordinaten  $q^i$  mit  $i = 1, \dots, D$  eine Sonderrolle zu. In diesem Kapitel wird eine Umformulierung der klassischen Mechanik vorgenommen, die auf einer gleichberechtigten Behandlung von Zeit- und Raumkoordinaten beruht. Dadurch wird der ursprünglich  $D$ -dimensionale Konfigurationsraum zu einem  $D + 1$ -dimensionalen Konfigurationsraum erweitert, der von der Zeitkoordinate  $t$  und den  $D$  Raumkoordinaten  $q^i$  aufgespannt wird. Die Systemdynamik wird dann durch eine Trajektorie in diesem  $D + 1$ -dimensionalen erweiterten Konfigurationsraum beschrieben, wobei die Rolle der Zeit  $t$  als Trajektorienparameter von einem neu eingeführten Parameter  $\vartheta$  übernommen wird.

Im folgenden wird näher untersucht, wie sich eine solche Dimensionserweiterung sowohl auf die Lagrangesche Mechanik (Abschnitt A.1) als auch auf die Hamiltonsche Mechanik (Abschnitt A.2) auswirkt. Die Darstellung lehnt sich eng an die ursprünglichen Veröffentlichungen von Dirac [19, 22], an die ausführliche Ausarbeitung von Mittelstaedt [92, S. 216] und an die Hinweise von Goldstein [45] an. In Abschnitt A.3 werden schließlich die nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen im Rahmen dieser Diracschen Formulierung der klassischen Mechanik untersucht. Dabei gelingt es, die nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen als verallgemeinerte kanonische Transformationen zu identifizieren.

## A.1 Lagrangesche Mechanik

Im Rahmen der Diracschen Formulierung der Lagrangeschen Mechanik stellt sich heraus, daß zwischen den  $D + 1$  betrachteten Freiheitsgraden eine Abhängigkeit besteht. Diese äußert sich sowohl in den  $D + 1$  Euler-Lagrange-Gleichungen als auch in der Eigenschaft der erweiterten Lagrange-Funktion, daß sie homogen von erster Ordnung in allen Geschwindigkeitskoordinaten ist.

### A.1.1 Dimensionserweiterung

Zwei verschiedene physikalische Gründe sprechen dafür, eine Umformulierung der klassischen Mechanik so vorzunehmen, daß der Zeitkoordinate  $t$  rein formal dieselbe Bedeutung zukommt wie den übrigen Raumkoordinaten  $q^i$ :

1. Eine gleichberechtigte Behandlung von Raum- und Zeitkoordinaten ermöglicht es, verallgemeinerte kanonische Transformationen einzuführen.
2. Im Hinblick auf eine Erweiterung der nichtrelativistischen zur relativistischen Mechanik ist es prinzipiell notwendig, Raum- und Zeitkoordinaten zu einer Einheit zusammenzufassen.

Eine solche Umformulierung der Mechanik wird aber auch aus mathematischer Sicht motiviert. Gewöhnlich fordert man, daß die zu beschreibende Trajektorie die explizite Gestalt

$$q^i = q^i(t) \tag{A.1}$$

besitzt. Eine allgemeinere Problemstellung entsteht dann, wenn man auch eine implizite Gestalt der Trajektorie zuläßt und hierzu einen neuen Parameter  $\vartheta$  einführt:

$$t = t(\vartheta), \quad q^i = q^i(t(\vartheta)). \tag{A.2}$$

Faßt man die Zeitkoordinate  $t$  als eine zusätzliche Koordinate  $\bar{q}^0$  auf, dann liegen insgesamt  $D + 1$  Raum-Zeit-Koordinaten  $\bar{q}^a$  mit  $a = 0, 1, \dots, D$  vor, die nach (A.2) vom neuen Trajektorienparameter  $\vartheta$  abhängen:

$$\bar{q}^a(\vartheta) = \begin{cases} t(\vartheta) & ; a = 0, \\ q^i(t(\vartheta)) & ; a = i = 1, \dots, D. \end{cases} \tag{A.3}$$

Aus der Definition (A.3) der Raum-Zeit-Koordinaten  $\bar{q}^a$  lassen sich unmittelbar die dazugehörigen Geschwindigkeitskoordinaten  $\bar{q}'^a$  ablesen

$$\bar{q}'^a(\vartheta) = \begin{cases} t'(\vartheta) & ; a = 0, \\ \dot{q}^i(t(\vartheta)) t'(\vartheta) & ; a = i = 1, \dots, D, \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

wobei der Strich ' die Ableitung nach dem neuen Parameter  $\vartheta$  bezeichnet. Durch die in (A.3) und (A.4) vorgenommene Dimensionserweiterung wird die Wirkung (2.22), die ein Funktional der Trajektorie  $q^i(t)$  im  $D$ -dimensionalen Konfigurationsraum darstellt, zu einem Funktional der Trajektorie  $\bar{q}^a(\vartheta)$  im  $D + 1$ -dimensionalen erweiterten Konfigurationsraum:

$$\bar{\mathcal{A}}^{(i)}[\bar{q}^a(\vartheta)] = \int_{\vartheta_1}^{\vartheta_2} \bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a(\vartheta); \bar{q}'^a(\vartheta)) d\vartheta. \quad (\text{A.5})$$

Dabei ergibt sich der Zusammenhang zwischen der ursprünglichen Lagrange-Funktion  $L^{(i)}(q^i; \dot{q}^i)$  und der erweiterten Lagrange-Funktion  $\bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{q}'^a)$  zu

$$\bar{L}^{(i)}(\bar{q}^0, \bar{q}^i; \bar{q}'^0, \bar{q}'^i) = \bar{q}'^0 L^{(i)}\left(\bar{q}^i; \frac{\bar{q}'^i}{\bar{q}'^0}\right). \quad (\text{A.6})$$

## A.1.2 Hamiltonsches Prinzip

Entsprechend überträgt sich das Hamiltonsche Prinzip (2.24) und (2.25) in der gewöhnlichen Formulierung der Lagrangeschen Mechanik auf die Diracsche Formulierung. Die im erweiterten Konfigurationsraum realisierte Trajektorie  $\bar{q}^a(\vartheta)$  annulliert die Variation der erweiterten Wirkung  $\bar{\mathcal{A}}^{(i)}[\bar{q}^a(\vartheta)]$  gemäß

$$\delta \bar{\mathcal{A}}^{(i)}[\bar{q}^a(\vartheta)] = 0, \quad (\text{A.7})$$

wobei die Variationen aller Raum-Zeit-Koordinaten  $\bar{q}^a$  an den beiden vorgegebenen Endpunkten 1 und 2 verschwinden:

$$\delta \bar{q}_1^a = \delta \bar{q}_2^a = 0. \quad (\text{A.8})$$

Im Unterschied zur gewöhnlichen Formulierung des Hamiltonschen Prinzips der Lagrangeschen Mechanik werden aber bei der Diracschen Formulierung den Variationen des Trajektorienparameters  $\vartheta$  an den Endpunkten 1 und 2 keinerlei Beschränkungen auferlegt:



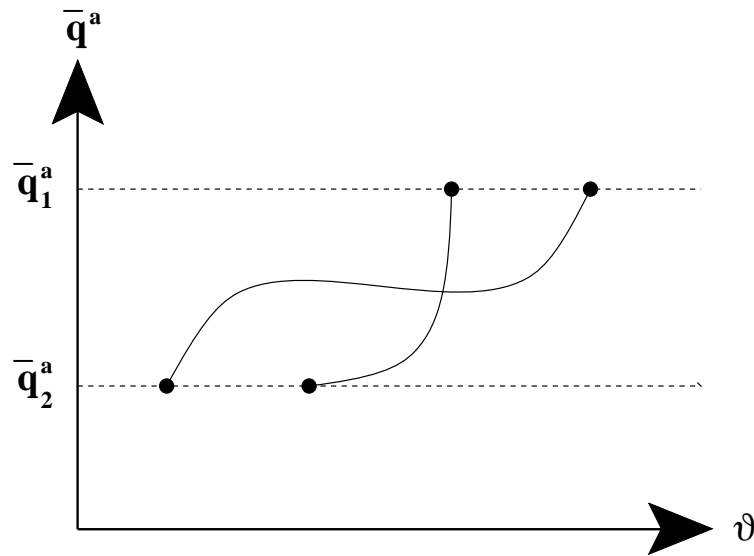


Abbildung A.1: Variationen der Trajektorie, die nach der Diracschen Formulierung des Hamiltonschen Prinzips der Lagrangeschen Mechanik zugelassen sind. An den Endpunkten 1 und 2 der Trajektorien ist der Trajektorienparameter  $\vartheta$  unbestimmt (vgl. Abbildung 2.1).

Nach den Standardmethoden der Variationsrechnung [121, S. 205] führt die Diracsche Formulierung des Hamiltonschen Prinzips (A.7) und (A.8) zu den  $D + 1$  Euler-Lagrange-Gleichungen

$$\frac{\partial \bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a(\vartheta); \bar{q}'^a(\vartheta))}{\partial \bar{q}^b(\vartheta)} - \frac{d}{d\vartheta} \frac{\partial \bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a(\vartheta); \bar{q}'^a(\vartheta))}{\partial \bar{q}'^b(\vartheta)} = 0 \quad (\text{A.9})$$

und für  $\vartheta = \vartheta_1$  beziehungsweise  $\vartheta = \vartheta_2$  zur Randbedingung

$$\bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a(\vartheta); \bar{q}'^a(\vartheta)) - \bar{q}'^b(\vartheta) \frac{\partial \bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a(\vartheta); \bar{q}'^a(\vartheta))}{\partial \bar{q}'^b(\vartheta)} = 0. \quad (\text{A.10})$$

Diese beiden Resultate lassen sich in den nächsten beiden Abschnitten dadurch interpretieren, daß man den Zusammenhang (A.6) zwischen der erweiterten Lagrange-Funktion  $\bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{q}'^a)$  und der ursprünglichen Lagrange-Funktion  $L^{(i)}(q^i; \dot{q}^i)$  beachtet.

### A.1.3 Euler-Lagrange-Gleichungen

Hierzu wird in (A.9) eine Fallunterscheidung bezüglich der zeitlichen und den räumlichen Euler-Lagrange-Gleichungen vorgenommen. Im Falle  $b = 0$  erhält man die

Aussage, daß die zur zyklischen Raum-Zeit-Koordinate  $\bar{q}^0$  kanonisch konjugierte Impulskoordinate

$$\bar{p}_0 = \frac{\partial \bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{q}'^a)}{\partial \bar{q}'^0} \quad (\text{A.11})$$

eine Erhaltungsgröße darstellt:

$$\frac{d}{d\vartheta} \bar{p}_0(\vartheta) = 0. \quad (\text{A.12})$$

Dabei nimmt diese Erhaltungsgröße  $\bar{p}_0$  die explizite Form

$$\bar{p}_0 = L^{(i)}\left(\bar{q}^i; \frac{\bar{q}'^i}{\bar{q}'^0}\right) - \frac{\bar{q}'^j}{\bar{q}'^0} \frac{\partial L^{(i)}\left(\bar{q}^i; \frac{\bar{q}'^i}{\bar{q}'^0}\right)}{\partial \left(\frac{\bar{q}'^j}{\bar{q}'^0}\right)} \quad (\text{A.13})$$

an, so daß sie aufgrund der Definitionen (A.3) und (A.4) sowie (2.44), (2.46) und (2.48) mit der negativen Hamilton-Funktion  $H^{(i)}(q^i; p_i)$  in der gewöhnlichen Formulierung der Lagrangeschen Mechanik identifiziert werden kann:

$$\bar{p}_0 = -H^{(i)}(q^i; p_i). \quad (\text{A.14})$$

Im Falle  $b = j$  reduzieren sich die Euler-Lagrange-Gleichungen (A.9) dagegen auf

$$\frac{\partial L^{(i)}\left(\bar{q}^i(\vartheta); \frac{\bar{q}'^i(\vartheta)}{\bar{q}'^0(\vartheta)}\right)}{\partial \bar{q}^j(\vartheta)} - \frac{1}{\bar{q}'^0(\vartheta)} \frac{d}{d\vartheta} \frac{\partial L^{(i)}\left(\bar{q}^i(\vartheta); \frac{\bar{q}'^i(\vartheta)}{\bar{q}'^0(\vartheta)}\right)}{\partial \left(\frac{\bar{q}'^j(\vartheta)}{\bar{q}'^0(\vartheta)}\right)} = 0. \quad (\text{A.15})$$

Beachtet man die Definitionen (A.3) und (A.4), so stimmt (A.15) mit den  $D$  Euler-Lagrange-Gleichungen (2.26) in der gewöhnlichen Formulierung der Lagrangeschen Mechanik überein.

Die Fallunterscheidung führt somit zu dem Ergebnis, daß der Energieerhaltungssatz in (A.12) und (A.14) gerade das erste Integral der  $D$  Euler-Lagrange-Gleichungen (A.15) darstellt. Hieraus kann man schließen, daß die  $D + 1$  Euler-Lagrange-Gleichungen (A.9) nicht voneinander unabhängig sind.

#### A.1.4 Randbedingung

Die erweiterte Lagrange-Funktion  $\bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{q}'^a)$  besitzt nach (A.6) die fundamentale Eigenschaft, daß sie homogen von erster Ordnung in allen  $D + 1$  Geschwindigkeits-

koordinaten  $\bar{q}'^a$  ist:

$$\bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a; \lambda \bar{q}'^a) = \lambda \bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{q}'^a). \quad (\text{A.16})$$

Deshalb wird die Formulierung der klassischen Mechanik, die die Raum- und die Zeitkoordinaten gleichberechtigt behandelt, von Dirac [19, 22] und von Mittelstaedt [92, S. 216] als „homogener Formalismus“ bezeichnet. Differenziert man (A.16) nach dem Parameter  $\lambda$  und wertet man die entstehende Gleichung an der Stelle  $\lambda = 1$  aus, so erhält man den entsprechenden Eulerschen Satz:

$$\bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{q}'^a) - \bar{q}'^b \frac{\partial \bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{q}'^a)}{\partial \bar{q}'^b} = 0. \quad (\text{A.17})$$

Er hat zur Folge, daß die Randbedingung (A.10) identisch erfüllt ist. Die Trajektorie  $\bar{q}^a(\vartheta)$  im erweiterten Konfigurationsraum wird demnach ausschließlich durch die  $D + 1$  Euler-Lagrange-Gleichungen (A.9) festgelegt.

Eine andere Konsequenz des Eulerschen Satzes (A.17) besteht darin, daß die erweiterte Wirkung (A.5) auch folgendermaßen umgeschrieben werden kann:

$$\bar{\mathcal{A}}^{(i)}[\bar{q}^a(\vartheta)] = \sum_{b=0}^D \int_{\bar{q}_1^b}^{\bar{q}_2^b} \frac{\partial \bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a(\vartheta); \bar{q}'^a(\vartheta))}{\partial \bar{q}'^b(\vartheta)} d\bar{q}^b(\vartheta). \quad (\text{A.18})$$

Da  $\partial \bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{q}'^a) / \partial \bar{q}'^b$  aufgrund von (A.16) homogen von nullter Ordnung in den Geschwindigkeitskoordinaten  $\bar{q}'^a$  ist und da  $\bar{q}_1^b, \bar{q}_2^b$  nach (A.8) fest vorgegebene Randwerte sind, ist die erweiterte Wirkung (A.18) invariant gegenüber allgemeinen Transformationen des Trajektorienparameters  $\vartheta$ . Demnach ist der Trajektorienparameter  $\vartheta$  in der Diracschen Formulierung der Lagrangeschen Mechanik physikalisch bedeutungslos und kann abhängig von der jeweils vorliegenden Situation geeignet gewählt werden.

## A.2 Hamiltonsche Mechanik

Im Rahmen der Diracschen Formulierung der Hamiltonschen Mechanik läßt sich der Begriff der kanonischen Transformationen dahingehend verallgemeinern, daß auch Transformationen der Zeitkoordinate und deren kanonisch konjugierter Impulskoordinate, der negativen Energie, möglich werden. Um eine geeignete Definition

dieser verallgemeinerten kanonischen Transformationen angeben zu können, ist es allerdings erforderlich, zunächst die Hamilton-Funktion und das modifizierte Hamiltonsche Prinzip zu erweitern.

### A.2.1 Erweiterte Hamilton-Funktion

Führt man zu den Raum-Zeit-Koordinaten  $\bar{q}^a$  die kanonisch konjugierten Impulskoordinaten

$$\bar{p}_b = \frac{\partial \bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{q}'^a)}{\partial \bar{q}'^b} \quad (\text{A.19})$$

ein, so kann man eine Legendre-Transformation der erweiterten Lagrange-Funktion  $\bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{q}'^a)$  vornehmen und zur erweiterten Hamilton-Funktion  $\bar{H}^{(i)}$  übergehen. Diese hängt dann zunächst von den Raum-Zeit-Koordinaten  $\bar{q}^a$ , den Geschwindigkeitskoordinaten  $\bar{q}'^a$  und den Impulskoordinaten  $\bar{p}_a$  ab:

$$\bar{H}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{p}_a; \bar{q}'^a) = \bar{q}'^a \bar{p}_a - \bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{q}'^a) . \quad (\text{A.20})$$

Um die Legendre-Transformation abzuschließen, müßte man die durch (A.19) definierte Beziehung

$$\bar{p}_b = \bar{p}_b(\bar{q}^a; \bar{q}'^a) \quad (\text{A.21})$$

zwischen den Impulskoordinaten  $\bar{p}_a$  und den Geschwindigkeitskoordinaten  $\bar{q}'^a$  invertieren:

$$\bar{q}'^b = \bar{q}'^b(\bar{q}^a; \bar{p}_a) . \quad (\text{A.22})$$

Dann wäre eine vollständige Elimination der Geschwindigkeitskoordinaten  $\bar{q}'^a$  in (A.20) gegeben und die erweiterte Hamilton-Funktion  $\bar{H}^{(i)}$  hinge nur noch von den Raum-Zeit-Koordinaten  $\bar{q}^a$  und den dazu kanonisch konjugierten Impulskoordinaten  $\bar{p}_a$  ab. Diese übliche Vorgehensweise ist aber hier nicht durchführbar. Aus der speziellen Form (A.6) der erweiterten Lagrange-Funktion  $\bar{L}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{q}'^a)$ , den Definitionen (A.3) und (A.4) sowie (2.44) liest man ab, daß die Impulskoordinaten (A.19) durch (A.14) und

$$\bar{p}_i = p_i \quad (\text{A.23})$$

gegeben sind. Demnach sind die Raum-Zeit-Koordinaten  $\bar{q}^a$  und die Impulskoordinaten  $\bar{p}_a$  der Diracschen Formulierung der Hamiltonschen Mechanik nicht unabhängig voneinander, sondern sie unterliegen der einschränkenden Nebenbedingung

$$\bar{f}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{p}_a) = \bar{p}_0 + H^{(i)}(\bar{q}^i; \bar{p}_i) = 0 . \quad (\text{A.24})$$

In diesem „ausgearteten Fall“ [92, S. 218] gelingt es lediglich, mit Hilfe von (A.3), (A.4), (2.46) und (2.48) die  $D$  räumlichen Geschwindigkeitskoordinaten  $\bar{q}'^i$  in (A.20) zu eliminieren. Die erweiterte Hamilton-Funktion lautet damit:

$$\bar{H}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{p}_a; \bar{q}'^0) = \bar{q}'^0 \left\{ \bar{p}_0 + H^{(i)}(\bar{q}^i; \bar{p}_i) \right\}. \quad (\text{A.25})$$

Außerdem erkennt man aufgrund des Eulerschen Satzes (A.17), (A.19) und (A.20) oder der Nebenbedingung (A.24) und (A.25), daß die erweiterte Hamilton-Funktion identisch verschwindet:

$$\bar{H}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{p}_a; \bar{q}'^0) = 0. \quad (\text{A.26})$$

## A.2.2 Modifiziertes Hamiltonsches Prinzip

In der Diracschen Formulierung der Hamiltonschen Mechanik wird die erweiterte Wirkung (A.5) zu einem Funktional der Trajektorie  $\bar{q}^a(\vartheta)$ ,  $\bar{p}_a(\vartheta)$  im erweiterten Phasenraum, das aufgrund des Eulerschen Satzes (A.17) und (A.19) die folgende explizite Gestalt besitzt:

$$\bar{\mathcal{A}}^{(i)}[\bar{q}^a(\vartheta); \bar{p}_a(\vartheta)] = \int_{\vartheta_1}^{\vartheta_2} \bar{q}'^a(\vartheta) \bar{p}_a(\vartheta) d\vartheta. \quad (\text{A.27})$$

Das modifizierte Hamiltonsche Prinzip besteht dann in der Variationsaufgabe

$$\delta \bar{\mathcal{A}}^{(i)}[\bar{q}^a(\vartheta); \bar{p}_a(\vartheta)] = 0, \quad (\text{A.28})$$

wobei die Variationen der Raum-Zeit-Koordinaten  $\bar{q}^a$  und der Impulskoordinaten  $\bar{p}_a$  durch die Nebenbedingung (A.24) eingeschränkt sind. Um diese Nebenbedingung (A.24) zu berücksichtigen, führt man den Lagrangeschen Multiplikator  $\lambda^{(i)}(\vartheta)$  ein und untersucht statt (A.27) und (A.28) das Variationsproblem

$$\delta \int_{\vartheta_1}^{\vartheta_2} \left\{ \bar{q}'^a(\vartheta) \bar{p}_a(\vartheta) - \lambda^{(i)}(\vartheta) \bar{F}^{(i)}(\bar{q}^a(\vartheta); \bar{p}_a(\vartheta)) \right\} d\vartheta = 0, \quad (\text{A.29})$$

bei dem die Raum-Zeit-Koordinaten  $\bar{q}^a$  und die Impulskoordinaten  $\bar{p}_a$  unabhängig voneinander variiert werden dürfen. Dabei wirkt sich die Unbestimmtheit des Trajektorienparameters  $\vartheta$  an den Endpunkten 1 und 2 nach [121, S. 205] wieder nicht auf die Bewegungsgleichungen aus, da die Trajektorie  $\bar{q}^a(\vartheta)$ ,  $\bar{p}_a(\vartheta)$  die Nebenbedingung (A.24) zu erfüllen hat. Ferner führt das Verschwinden der Raum-Zeit-Koordinaten

$\bar{q}^a$  an den Endpunkten 1 und 2 gemäß (A.8) dazu, daß das Variationsproblem (A.29) in die Bewegungsgleichungen

$$\bar{q}'^b(\vartheta) = +\lambda^{(i)}(\vartheta) \frac{\partial \bar{f}^{(i)}(\bar{q}^a(\vartheta); \bar{p}_a(\vartheta))}{\partial \bar{p}_b(\vartheta)}, \quad (\text{A.30})$$

$$\bar{p}'_b(\vartheta) = -\lambda^{(i)}(\vartheta) \frac{\partial \bar{f}^{(i)}(\bar{q}^a(\vartheta); \bar{p}_a(\vartheta))}{\partial \bar{q}^b(\vartheta)} \quad (\text{A.31})$$

übergeht, die zusammen mit der Nebenbedingung (A.24) die  $2D + 3$  Funktionen  $\lambda^{(i)}(\vartheta)$ ,  $\bar{q}^a(\vartheta)$ ,  $\bar{p}_a(\vartheta)$  festlegen. Im Falle  $b = 0$  reduzieren sich diese Bewegungsgleichungen auf den Energieerhaltungssatz (A.12) und auf die Festlegung des Lagrangeschen Multiplikators  $\lambda^{(i)}(\vartheta)$  durch

$$\lambda^{(i)}(\vartheta) = \bar{q}'^0(\vartheta), \quad (\text{A.32})$$

während man im Falle  $b = j$  unter Beachtung der Definitionen (A.3) und (A.4) die Hamilton-Gleichungen (2.50) und (2.51) zurückgewinnt. Eine symmetrischere Form der Bewegungsgleichungen (A.30) und (A.31) erhält man, wenn man den Lagrangeschen Multiplikator  $\lambda^{(i)}(\vartheta)$  mit (A.32) eliminiert und die aus (A.25) und (A.26) ablesbare Beziehung

$$\bar{H}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{p}_a; \bar{q}'^0) = \bar{q}'^0 \bar{f}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{p}_a) \quad (\text{A.33})$$

beachtet. Die Bewegungsgleichungen lassen sich demnach formal auf die kanonische Form bringen:

$$\bar{q}'^b(\vartheta) = + \frac{\partial \bar{H}^{(i)}(\bar{q}^a(\vartheta); \bar{p}_a(\vartheta); \bar{q}'^0)}{\partial \bar{p}_b(\vartheta)}, \quad (\text{A.34})$$

$$\bar{p}'_b(\vartheta) = - \frac{\partial \bar{H}^{(i)}(\bar{q}^a(\vartheta); \bar{p}_a(\vartheta); \bar{q}'^0)}{\partial \bar{q}^b(\vartheta)}. \quad (\text{A.35})$$

### A.2.3 Verallgemeinerte kanonische Transformationen

In der gewöhnlichen Formulierung der Hamiltonschen Mechanik werden nur die Raumkoordinaten und die dazu kanonisch konjugierten Impulskoordinaten als unabhängige Variablen aufgefaßt. Bei den entsprechenden kanonischen Transformationen zwischen diesen unabhängigen Variablen wird die Zeitkoordinate als Trajektorienparameter nicht verändert. Demgegenüber ermöglicht es die Diracsche Formulierung auf natürliche Weise, auch Transformationen der Zeitkoordinate durchzuführen, da die Raum- und die Zeitkoordinaten gleichberechtigt behandelt werden.

Dies führt zu einer Verallgemeinerung des Begriffes der kanonischen Transformationen.

Eine Transformation der  $2D + 2$  Koordinaten  $\bar{q}^a, \bar{p}_a$  mit  $a = 0, 1, \dots, D$  zu neuen  $2D + 2$  Koordinaten  $\bar{Q}^\alpha, \bar{P}_\alpha$  mit  $\alpha = 0, 1, \dots, D$  gemäß

$$\bar{q}^a = \bar{q}^a(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha), \quad (\text{A.36})$$

$$\bar{p}_a = \bar{p}_a(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha) \quad (\text{A.37})$$

wird als verallgemeinerte kanonische Transformation bezeichnet, wenn sie die Bewegungsgleichungen (A.30) und (A.31) mit einer Nebenbedingung

$$\bar{f}^{(i)}(\bar{q}^a; \bar{p}_a) = 0 \quad (\text{A.38})$$

in die Bewegungsgleichungen

$$\bar{Q}'^\beta(\vartheta) = +\lambda^{(f)}(\vartheta) \frac{\partial \bar{f}^{(f)}(\bar{Q}^\alpha(\vartheta); \bar{P}_\alpha(\vartheta))}{\partial \bar{P}_\beta(\vartheta)}, \quad (\text{A.39})$$

$$\bar{P}'_\beta(\vartheta) = -\lambda^{(f)}(\vartheta) \frac{\partial \bar{f}^{(f)}(\bar{Q}^\alpha(\vartheta); \bar{P}_\alpha(\vartheta))}{\partial \bar{Q}^\beta(\vartheta)} \quad (\text{A.40})$$

mit einer anderen Nebenbedingung

$$\bar{f}^{(f)}(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha) = 0 \quad (\text{A.41})$$

überführt. Die einfachste Möglichkeit, die neue Nebenbedingung (A.41) aus der alten (A.38) zu gewinnen, besteht in der Setzung

$$\bar{f}^{(f)}(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha) = \bar{f}(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha) \bar{f}^{(i)}(\bar{q}^a(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha); \bar{p}_a(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha)), \quad (\text{A.42})$$

wobei  $\bar{f}(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha)$  eine willkürliche Funktion darstellt. Analog zur Theorie der kanonischen Transformationen [77, S. 112] läßt sich in diesem Fall zeigen, daß die Transformation (A.36) und (A.37) genau dann eine verallgemeinerte kanonische Transformation darstellt, wenn sie die fundamentalen Poisson-Klammern nicht verändert:

$$\left\{ \bar{q}^a(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha), \bar{p}_b(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha) \right\}_{\bar{Q}, \bar{P}} = \delta^a_b, \quad (\text{A.43})$$

$$\left\{ \bar{q}^a(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha), \bar{q}^b(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha) \right\}_{\bar{Q}, \bar{P}} = 0, \quad (\text{A.44})$$

$$\left\{ \bar{p}_a(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha), \bar{p}_b(\bar{Q}^\alpha; \bar{P}_\alpha) \right\}_{\bar{Q}, \bar{P}} = 0. \quad (\text{A.45})$$

Hierbei sind die Poisson-Klammern zweier Funktionen  $\overline{F}(\overline{Q}^\alpha; \overline{P}_\alpha)$  und  $\overline{G}(\overline{Q}^\alpha; \overline{P}_\alpha)$  wie üblich definiert durch

$$\begin{aligned} & \left\{ \overline{F}(\overline{Q}^\alpha; \overline{P}_\alpha), \overline{G}(\overline{Q}^\alpha; \overline{P}_\alpha) \right\}_{\overline{Q}, \overline{P}} = \\ & \frac{\partial \overline{F}(\overline{Q}^\alpha; \overline{P}_\alpha)}{\partial \overline{Q}^\beta} \frac{\partial \overline{G}(\overline{Q}^\alpha; \overline{P}_\alpha)}{\partial \overline{P}_\beta} - \frac{\partial \overline{F}(\overline{Q}^\alpha; \overline{P}_\alpha)}{\partial \overline{P}_\beta} \frac{\partial \overline{G}(\overline{Q}^\alpha; \overline{P}_\alpha)}{\partial \overline{Q}^\beta}. \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

Ferner erhält man aus (A.42), daß sich die Lagrangeschen Multiplikatoren wie folgt transformieren:

$$\lambda^{(f)}(\vartheta) = \frac{1}{\overline{f}(\overline{Q}^\alpha(\vartheta); \overline{P}_\alpha(\vartheta))} \lambda^{(i)}(\vartheta). \quad (\text{A.47})$$

Abschließend sei darauf hingewiesen, daß die hier angegebene Definition einer verallgemeinerten kanonischen Transformation von der Mittelstaedtschen [92, S. 235] abweicht. Mittelstaedt fordert nämlich noch zusätzlich die einschränkende Eigenschaft, daß die spezielle Nebenbedingung (A.24) forminvariant ist. Diese Definition ist aber zu eng gefaßt, da sie eine Reihe von Transformationen nicht beinhaltet, die eigentlich als verallgemeinerte kanonische Transformationen angesehen werden sollten. Beispielsweise stellt die Vertauschung der Zeitkoordinaten  $\overline{q}^0$  mit ihrer kanonisch konjugierten Impulskordinaten  $\overline{p}_0$  gemäß

$$\overline{Q}^0 = + \overline{p}_0, \quad \overline{P}_0 = - \overline{q}^0, \quad (\text{A.48})$$

$$\overline{Q}^i = + \overline{q}^i, \quad \overline{P}_i = + \overline{p}_i \quad (\text{A.49})$$

im Mittelstaedtschen Sinne keine verallgemeinerte kanonische Transformation dar, während sie in der hier angegebenen Definition mitenthalten ist.

### A.3 Nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation

Da die Diracsche Formulierung der klassischen Mechanik die Raum- und die Zeitkoordinaten formal gleichberechtigt behandelt, bildet sie den natürlichen Rahmen, um die nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen einzuarbeiten. Dabei ermöglicht die Diracsche Formulierung der Lagrangeschen Mechanik, die integrable Raumtransformation (1.19) und die nichtintegrale Zeittransformation (1.20) in einem einzigen Schritt durchzuführen. Mit Hilfe der Diracschen Formulierung der Hamiltonschen Mechanik gelingt es außerdem, die nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen als verallgemeinerte kanonische Transformationen zu identifizieren.



### A.3.1 Lagrangesche Mechanik

In der Diracschen Formulierung der Lagrangeschen Mechanik faßt man die Zeitkoordinate  $t$  und die  $D$  Raumkoordinaten  $q^i$  mit  $i = 1, \dots, D$  gemäß (A.3) zu  $D + 1$  Raum-Zeit-Koordinaten  $\bar{q}^a$  mit  $a = 0, 1, \dots, D$  zusammen und definiert die dazugehörigen Geschwindigkeitskoordinaten  $\bar{q}'^a$  durch (A.4). Führt man im Hinblick auf eine nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation (1.19) und (1.20) eine neue Zeitkoordinate  $s$  und  $D$  neue Raumkoordinaten  $Q^\lambda$  mit  $\lambda = 1, \dots, D$  ein, so lassen sich diese analog zu (A.3) zu  $D + 1$  Raum-Zeit-Koordinaten  $\bar{Q}^\alpha$  mit  $\alpha = 0, 1, \dots, D$  zusammenfassen:

$$\bar{Q}^\alpha(\vartheta) = \begin{cases} s(\vartheta) & ; \alpha = 0, \\ Q^\lambda(s(\vartheta)) & ; \alpha = \lambda = 1, \dots, D. \end{cases} \quad (\text{A.50})$$

Die entsprechenden Geschwindigkeitskoordinaten ergeben sich wie in (A.4) zu

$$\bar{Q}'^\alpha(\vartheta) = \begin{cases} s'(\vartheta) & ; \alpha = 0, \\ \overset{\circ}{Q}^\lambda(s(\vartheta)) s'(\vartheta) & ; \alpha = \lambda = 1, \dots, D. \end{cases} \quad (\text{A.51})$$

Die Dimensionserweiterungen (A.3), (A.4) und (A.50), (A.51) ermöglichen es dann, die nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen auch auf die Diracsche Formulierung der Lagrangeschen Mechanik zu übertragen. Für die integrale Raumtransformation (1.19) erhält man unmittelbar

$$\bar{q}^i = q^i(\bar{Q}), \quad (\text{A.52})$$

während die nichtintegrale Zeittransformation (1.20) zu einer linearen Beziehung zwischen den zeitlichen Geschwindigkeitskoordinaten führt:

$$\bar{q}'^0 = f(\bar{Q}) \bar{Q}'^0. \quad (\text{A.53})$$

Arbeitet man (A.52) und (A.53) in die erweiterte Wirkung (A.5) des Ausgangssystems ein, so geht daraus die erweiterte Wirkung

$$\bar{\mathcal{A}}^{(f)}[\bar{Q}^\alpha(\vartheta)] = \int_{\vartheta_1}^{\vartheta_2} \bar{L}^{(f)}(\bar{Q}^\alpha(\vartheta); \bar{Q}'^\alpha(\vartheta)) d\vartheta \quad (\text{A.54})$$

des Endsystems mit der erweiterten Lagrange-Funktion

$$\bar{L}^{(f)}(\bar{Q}^0, \bar{Q}^\lambda; \bar{Q}'^0, \bar{Q}'^\lambda) = \bar{L}^{(i)}(\bar{q}^0(\bar{Q}^0, \bar{Q}), q^i(\bar{Q}); f(\bar{Q}) \bar{Q}'^0, e^i_\lambda(\bar{Q}) \bar{Q}'^\lambda) \quad (\text{A.55})$$

hervor. Dabei ist der durch Integration von (A.53) festgelegte Zusammenhang

$$\bar{q}^0 = \bar{q}^0(\bar{Q}^0, \bar{Q}) \quad (\text{A.56})$$

redundant, wenn die erweiterte Lagrange-Funktion  $\bar{L}^{(i)}(\bar{q}^0, \bar{q}^i; \bar{q}'^0, \bar{q}'^i)$  des Ausgangssystems nicht explizit von der Raum-Zeit-Koordinate  $\bar{q}^0$  abhängt.

Dies trifft beispielsweise für eine Punktmasse  $m$  zu, die sich auf einer  $D$ -dimensionalen Riemann-Mannigfaltigkeit unter dem Einfluß äußerer Felder bewegt und deren Lagrange-Funktion durch (2.23) gegeben ist. Nach (A.3), (A.4) und (A.6) lautet nämlich die erweiterte Lagrange-Funktion des Ausgangssystems

$$\bar{L}^{(i)}(\bar{q}^0, \bar{q}^i; \bar{q}'^0, \bar{q}'^i) = \frac{m}{2} g_{ij}^{(i)}(\bar{q}) \frac{\bar{q}'^i \bar{q}'^j}{\bar{q}'^0} - \bar{q}'^0 V^{(i)}(\bar{q}) + \bar{q}'^i A_i^{(i)}(\bar{q}). \quad (\text{A.57})$$

Die nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation (A.52) und (A.53) führt dann gemäß (A.55) zur folgenden transformierten erweiterten Lagrange-Funktion

$$\begin{aligned} \bar{L}^{(f)}(\bar{Q}^0, \bar{Q}^\lambda; \bar{Q}'^0, \bar{Q}'^\lambda) &= \frac{m}{2} g_{\lambda\mu}^{(f)}(\bar{Q}) \frac{\bar{Q}'^\lambda \bar{Q}'^\mu}{\bar{Q}'^0} \\ &\quad - \bar{Q}'^0 V^{(f)}(\bar{Q}) + \bar{Q}'^\lambda A_\lambda^{(f)}(\bar{Q}), \end{aligned} \quad (\text{A.58})$$

wobei die Transformationen der Metrik, des Vektorpotentials und des skalaren Potentials gemäß (2.78)–(2.80) gegeben sind. Damit stimmt das im Rahmen der Diracschen Formulierung gewonnene Ergebnis (A.58) mit dem der gewöhnlichen Formulierung in (2.35) überein, wenn man die Dimensionserweiterung (A.50), (A.51) und den zu (A.6) analogen Zusammenhang

$$\bar{L}^{(f)}(\bar{Q}^0, \bar{Q}^\lambda; \bar{Q}'^0, \bar{Q}'^\lambda) = \bar{Q}'^0 L^{(f)}\left(\bar{Q}^\lambda; \frac{\bar{Q}'^\lambda}{\bar{Q}'^0}\right) \quad (\text{A.59})$$

beachtet.

### A.3.2 Hamiltonsche Mechanik

In der Diracschen Formulierung der Hamiltonschen Mechanik wird die Dynamik des Ausgangssystems in einem  $2D + 2$ -dimensionalen erweiterten Phasenraum beschrieben, der von den Raum-Zeit-Koordinaten  $\bar{q}^a$  mit  $a = 0, 1, \dots, D$  aus (A.3) und den dazu kanonisch konjugierten Impulskoordinaten  $\bar{p}_a$  mit  $a = 0, 1, \dots, D$  aus (A.14),

(A.23) aufgespannt wird. Die nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation (A.52), (A.53) führt das Ausgangssystem in ein Endsystem über, das durch die Raum-Zeit-Koordinaten  $\overline{Q}^\alpha$  mit  $\alpha = 0, 1, \dots, D$  aus (A.50) und durch die Impulskoordinaten

$$\overline{P}_\beta = \frac{\partial \overline{L}^{(f)}(\overline{Q}^\alpha; \overline{Q}'^\alpha)}{\partial \overline{Q}'^\beta} \quad (\text{A.60})$$

mit  $\beta = 0, 1, \dots, D$  charakterisiert ist. Aufgrund der speziellen Form (A.59) der transformierten erweiterte Lagrange-Funktion reduziert sich die Definition der Impulskoordinaten (A.60) analog zu (A.14), (A.23) auf

$$\overline{P}_\beta = \begin{cases} -H^{(f)}(Q^\lambda; P_\lambda) & ; \beta = 0, \\ P_\lambda & ; \beta = \lambda = 1, \dots, D. \end{cases} \quad (\text{A.61})$$

Außerdem ist aus der Transformation der erweiterten Lagrange-Funktion (A.55) eine entsprechende Transformation der Impulskoordinaten ablesbar:

$$\overline{p}_0 = \frac{1}{f(\overline{Q})} \overline{P}_0, \quad (\text{A.62})$$

$$\overline{p}_i = e_i^\lambda(\overline{Q}) \overline{P}_\lambda. \quad (\text{A.63})$$

Nach (A.52), (A.53), (A.62), (A.63) liegt insgesamt eine verallgemeinerte kanonische Transformation vor, da die fundamentalen Poisson-Klammern (A.43)–(A.45) mit der Definition (A.46) nicht verändert werden. Beachtet man (2.61), (2.69), (A.3), (A.52), (A.61)–(A.63) und legt man die noch freie Funktion  $\overline{f}(\overline{Q}^\alpha; \overline{P}_\alpha)$  in (A.42) durch

$$\overline{f}(\overline{Q}^\alpha; \overline{P}_\alpha) = \frac{1}{f(\overline{Q})} \quad (\text{A.64})$$

fest, dann bleibt die spezielle Nebenbedingung (A.24) forminvariant:

$$\overline{f}^{(f)}(\overline{Q}^\alpha; \overline{P}_\alpha) = \overline{P}_0 + H^{(f)}(\overline{Q}^\alpha; \overline{P}_\alpha) = 0. \quad (\text{A.65})$$

Demnach handelt es sich bei den nichtintegralen Raum-Zeit-Transformationen (1.19), (1.20) sogar um verallgemeinerte kanonische Transformationen im Sinne von Mittelstaedt [92, S. 235]. Dieses fundamentale Ergebnis entspricht dem von Stiefel und Scheifele [124, Part II] gewonnenen Resultat, daß die Kustaanheim-Stiefel-Transformation zwischen dem dreidimensionalen Kepler-Problem und dem vierdimensionalen harmonischen Oszillator eine verallgemeinerte kanonische Transformation darstellt.

*Andererseits ist es aber doch sicher, daß  
die Mathematik überhaupt und im speziellen  
auch die Geometrie ihre Entstehung dem  
Bedürfnis verdankt, etwas zu erfahren  
über das Verhalten wirklicher Dinge.*  
A. Einstein (1879 – 1957)

## Anhang B

# Differentialgeometrie

In Kapitel 3 führt die Forminvarianz der Quantenmechanik unter nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen zu einer Transformationsvorschrift (3.171) zwischen den skalaren Potentialen des Ausgangs- und des Endsystems, die aus einer nullten und einer zweiten Ordnung im Planckschen Wirkungsquantum besteht. Während die nullte Ordnung mit dem entsprechenden klassischen Resultat (2.81) von Kapitel 2 übereinstimmt, ist eine Interpretation der zweiten Ordnung bisher offen geblieben. Deshalb wird im vorliegenden Kapitel angestrebt, eine anschauliche differentialgeometrische Interpretation dieser zweiten Ordnung zu entwickeln.

Die dabei notwendigen Grundlagen der Riemann-Cartan-Differentialgeometrie werden ausführlich in Abschnitt B.1 zusammengefaßt. Die systematische Darstellung lehnt sich eng an die physikalischen Anwendungen der Riemann-Cartan-Differentialgeometrie im Rahmen der allgemein relativistischen Einstein-Cartan-Theorie [63, 64, 65, 80, 115] und der Kontinuumstheorie der Defekte [80, 85, 86] an. Eine weitergehende mathematische Einführung stellt die auch heute noch aktuelle Monographie von Schouten [111] bereit. In Abschnitt B.2 werden dann eingehend die Konsequenzen nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen im Rahmen der Riemann-Cartan-Differentialgeometrie untersucht. Danach kann in Abschnitt B.3 die zweite Ordnung im Planckschen Wirkungsquantum in der Transformationsvorschrift (3.171) für skalare Potentiale mit derjenigen Krümmung und Torsion der Raum-Zeit-Struktur identifiziert werden, die eine nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation hervorruft. Dieses Ergebnis ist mit der physikalischen Vorstellung Feynmans [32, 33, 34, 35] verträglich, daß ein quantenmechanisches Teilchen im Unterschied zu einem klassischen Teilchen alle möglichen Wege in der Raum-Zeit durchläuft.

## B.1 Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit

Stattet man eine Mannigfaltigkeit mit einem affinen Zusammenhang und mit einer Metrik aus, so lassen sich Tensoren kovariant ableiten und deren Indizes herauf- oder herunterziehen. Beide Operationen vertauschen nur dann miteinander, wenn zwischen dem affinen Zusammenhang und der Metrik eine bestimmte Kompatibilitätsbedingung besteht. In diesem Fall bezeichnet man die Mannigfaltigkeit als Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit und charakterisiert ihre differentialgeometrischen Eigenschaften durch den Cartanschen Torsionstensor und durch den Cartanschen Krümmungstensor. Es zeigt sich, daß eine Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit sowohl durch eine integrable als auch durch eine nichtintegrable Koordinatentransformation wieder in eine Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit überführt wird.

### B.1.1 Mannigfaltigkeit

Eine  $D$ -dimensionale Mannigfaltigkeit stellt ein Kontinuum dar, dessen einzelne Punkte mit Koordinaten  $q^i$  für  $i = 1, \dots, D$  versehen sind. Sie verändert sich nicht, wenn man eine Umbenennung der Koordinaten im Sinne einer passiven Koordinatentransformation vornimmt. Geht man beispielsweise von den alten Koordinaten  $q^i$  für  $i = 1, \dots, D$  lokal zu neuen Koordinaten  $Q^\lambda$  für  $\lambda = 1, \dots, D$  über

$$q^i = q^i(Q), \quad Q^\lambda = Q^\lambda(q), \quad (\text{B.1})$$

so transformieren sich die infinitesimalen Veränderungen gemäß

$$dq^i = e^i_\lambda(Q) dQ^\lambda, \quad dQ^\lambda = e_i^\lambda(Q) dq^i. \quad (\text{B.2})$$

Hierbei erfüllen das  $D$ -Bein

$$e^i_\lambda(Q) = \partial_\lambda q^i(Q) \quad (\text{B.3})$$

und das reziproke  $D$ -Bein

$$e_i^\lambda(Q) = \partial_i Q^\lambda(q(Q)) \quad (\text{B.4})$$

die Orthonormalitäts- und die Vollständigkeitsrelation

$$e^i_\lambda(Q) e_i^\mu(Q) = \delta_\lambda^\mu, \quad (\text{B.5})$$

$$e^i_\lambda(Q) e_j^\lambda(Q) = \delta^i_j. \quad (\text{B.6})$$

Die Gradienten bezüglich der alten und der neuen Koordinaten transformieren sich kontragredient zu (B.2):

$$\partial_i = e_i^\lambda(Q) \partial_\lambda, \quad \partial_\lambda = e^\lambda_i(Q) \partial_i. \quad (\text{B.7})$$

Die Koordinatentransformation nennt man integrabel, wenn die lokale Beziehung (B.1) zwischen den alten und den neuen Koordinaten auch global existiert. Nach dem Satz von Schwarz [8, S. 568], [66, S. 251] vertauschen dann die zweiten partiellen Ableitungen und das  $D$ -Bein  $e^\lambda_i(Q)$  sowie das reziproke  $D$ -Bein  $e_i^\lambda(Q)$  erfüllen mit (B.3), (B.4) die Integrabilitätseigenschaft

$$\partial_\mu e^\lambda_i(Q) = \partial_\lambda e^\lambda_\mu(Q), \quad \partial_j e_i^\lambda(Q(q)) = \partial_i e_j^\lambda(Q(q)). \quad (\text{B.8})$$

Existiert (B.1) dagegen nur lokal, so liegt eine nichtintegrable Koordinatentransformation vor, die die Integrabilitätseigenschaft (B.8) nicht besitzt.

Auf einer Mannigfaltigkeit lassen sich Tensoren unterschiedlicher Stufe einführen, indem man ihr Transformationsverhalten bei einer Koordinatentransformation (B.1) festlegt. Für Skalare  $V^{(i)}(q)$  gilt

$$V^{(i)}(q) = V^{(f)}(Q(q)), \quad V^{(f)}(Q) = V^{(i)}(q(Q)), \quad (\text{B.9})$$

während sich kontravariante Vektoren  $A^{(i)i}(q)$  und kovariante Vektoren  $A_i^{(i)}(q)$  analog zu (B.2) und (B.7) kontragredient transformieren:

$$A^{(i)i}(q) = e^\lambda_i(Q(q)) A^{(f)\lambda}(Q(q)), \quad A^{(f)\lambda}(Q) = e_i^\lambda(Q) A^{(i)i}(q(Q)), \quad (\text{B.10})$$

$$A_i^{(i)}(q) = e_i^\lambda(Q(q)) A_\lambda^{(f)}(Q(q)), \quad A_\lambda^{(f)}(Q) = e^\lambda_i(Q) A_i^{(i)}(q(Q)). \quad (\text{B.11})$$

Entsprechend werden Tensoren höherer Stufe eingeführt, die mehrere ko- oder kontravariante Indizes besitzen.

## B.1.2 Affiner Zusammenhang

Die kovariante Ableitung eines Tensors wird so definiert, daß ein Tensor mit einer um eins höheren Stufe entsteht. Bei einem Skalar  $V^{(i)}(q)$  reicht es aus, dessen kovariante Ableitung  $D_i^{(i)}$  mit der partiellen Ableitung  $\partial_i$  zu identifizieren

$$D_i^{(i)} V^{(i)}(q) = \partial_i V^{(i)}(q), \quad (\text{B.12})$$

da dies wegen (B.7) zu einem kovarianten Vektor führt. Schon bei der kovarianten Ableitung  $D_j^{(i)}$  eines kontravarianten Vektors  $A^{(i)i}(q)$  ist man aber gezwungen, ein Strukturelement der Mannigfaltigkeit, den affinen Zusammenhang  $\Gamma_{jk}^{(i)i}(q)$ , einzuführen:

$$D_j^{(i)} A^{(i)i}(q) = \partial_j A^{(i)i}(q) + \Gamma_{jk}^{(i)i}(q) A^{(i)k}(q). \quad (\text{B.13})$$

Die Forderung, daß sich (B.13) wie ein Tensor zweiter Stufe transformiert

$$D_\mu^{(f)} A^{(f)\lambda}(Q) = e_i^\lambda(Q) e_\mu^j(Q) D_j^{(i)} A^{(i)i}(q(Q)) \quad (\text{B.14})$$

und dabei seine Bedeutung als kovariante Ableitung eines kontravarianten Vektors beibehält

$$D_\mu^{(f)} A^{(f)\lambda}(Q) = \partial_\mu A^{(f)\lambda}(Q) + \Gamma_{\mu\nu}^{(f)\lambda}(Q) A^{(f)\nu}(Q), \quad (\text{B.15})$$

läßt sich dann unter Beachtung von (B.7) und (B.10) durch die folgende Transformationsvorschrift für den affinen Zusammenhang erfüllen:

$$\Gamma_{\mu\nu}^{(f)\lambda}(Q) = e_i^\lambda(Q) e_\mu^j(Q) e_\nu^k(Q) \Gamma_{jk}^{(i)i}(q(Q)) + e_i^\lambda(Q) \partial_\mu e^i_\nu(Q). \quad (\text{B.16})$$

Demnach stellt der affine Zusammenhang  $\Gamma_{jk}^{(i)i}(q)$  keinen Tensor dritter Stufe dar. Der antisymmetrische Anteil bezüglich der beiden unteren Indizes

$$S_{jk}^{(i)i}(q) = \frac{1}{2} \{ \Gamma_{jk}^{(i)i}(q) - \Gamma_{kj}^{(i)i}(q) \} \quad (\text{B.17})$$

charakterisiert eine differentialgeometrische Eigenschaft der Mannigfaltigkeit. Er beschreibt, inwieweit infinitesimale Parallelelogramme auf der Mannigfaltigkeit geschlossen sind. Man bezeichnet  $S_{jk}^{(i)i}(q)$  als Cartanschen Torsionstensor, obwohl sein Transformationsverhalten nach (B.16) und (B.17) von dem eines Tensors dritter Stufe abweicht:

$$\begin{aligned} S_{\mu\nu}^{(f)\lambda}(Q) &= e_i^\lambda(Q) e_\mu^j(Q) e_\nu^k(Q) S_{jk}^{(i)i}(q(Q)) \\ &+ \frac{1}{2} e_i^\lambda(Q) \{ \partial_\mu e^i_\nu(Q) - \partial_\nu e^i_\mu(Q) \}. \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Nur bei integralen Koordinatentransformationen transformiert sich  $S_{jk}^{(i)i}(q)$  aufgrund der Integrabilitätseigenschaft (B.8) wie ein Tensor dritter Stufe. Entsprechendes gilt für die Kontraktion des Cartanschen Torsionstensors, den sogenannten Cartanschen Torsionsvektor

$$S_j^{(i)}(q) = S_{ji}^{(i)i}(q). \quad (\text{B.19})$$

Der Vollständigkeit halber sei noch erwähnt, daß auch die kovariante Ableitung  $D_i^{(i)}$  eines kovarianten Vektors  $A_j^{(i)}(q)$  gebildet werden kann, indem man die Produktregel

$$D_i^{(i)} \{A_j^{(i)}(q) B^{(i)j}(q)\} = A_j^{(i)}(q) D_i^{(i)} B^{(i)j}(q) + B^{(i)j}(q) D_i^{(i)} A_j^{(i)}(q) \quad (\text{B.20})$$

fordert. Aus (B.12), (B.13) und (B.20) erhält man hierfür

$$D_i^{(i)} A_j^{(i)}(q) = \partial_i A_j^{(i)}(q) - \Gamma_{ij}^{(i)k}(q) A_k^{(i)}(q). \quad (\text{B.21})$$

Die kovariante Ableitung eines Tensors höherer Stufe ist dadurch definiert, daß jeder kontravariante und jeder kovariante Index zu einem Summanden mit einem affinen Zusammenhang wie in (B.13) und (B.21) führt.

### B.1.3 Metrik

Eine Mannigfaltigkeit läßt sich unabhängig vom affinen Zusammenhang  $\Gamma_{jk}^{(i)i}(q)$  mit einem weiteren Strukturelement versehen. Führt man die kovariante Metrik

$$g_{ij}^{(i)}(q) = g_{ji}^{(i)}(q) \quad (\text{B.22})$$

und die dazu inverse kontravariante Metrik

$$g^{(i)ij}(q) = g^{(i)ji}(q) \quad (\text{B.23})$$

mit der Bedingung

$$g_{ij}^{(i)}(q) g^{(i)jk}(q) = \delta_i^k \quad (\text{B.24})$$

ein, so kann man die ko- und kontravarianten Größen auf der Mannigfaltigkeit ineinander umrechnen. Beispielsweise gilt für die ko- und kontravarianten Vektoren

$$A_i^{(i)}(q) = g_{ij}^{(i)}(q) A^{(i)j}(q), \quad A^{(i)i}(q) = g^{(i)ij}(q) A_j^{(i)}(q). \quad (\text{B.25})$$

Bei der kontragredienten Transformation (B.10) und (B.11) bleibt diese Beziehung bestehen

$$A_\lambda^{(f)}(Q) = g_{\lambda\mu}^{(f)}(Q) A^{(f)\mu}(Q), \quad A^{(f)\lambda}(Q) = g^{(f)\lambda\mu}(Q) A_\mu^{(f)}(Q), \quad (\text{B.26})$$

wenn sich die beiden Metriken wie Tensoren zweiter Stufe transformieren:

$$g_{\lambda\mu}^{(f)}(Q) = e_\lambda^i(Q) e_\mu^j(Q) g_{ij}^{(i)}(q(Q)), \quad (\text{B.27})$$

$$g^{(f)\lambda\mu}(Q) = e_i^\lambda(Q) e_j^\mu(Q) g^{(i)ij}(q(Q)). \quad (\text{B.28})$$

Jeder einzelne Index eines Tensors höherer Stufe läßt sich analog zu (B.25) durch Anwendung der ko- oder kontravarianten Metrik herunter- oder heraufziehen.



### B.1.4 Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit

Eine Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit liegt vor, wenn zwischen den beiden Strukturelementen einer Mannigfaltigkeit, dem affinen Zusammenhang und den Metriken, eine bestimmte Kompatibilitätsbedingung besteht. Es wird gefordert, daß die Bildung einer kovarianten Ableitung mit dem affinen Zusammenhang und das Herunter- oder Heraufziehen eines Index mit der ko- oder kontravarianten Metrik vertauschbar ist. Im Falle von Vektoren lautet diese Forderung

$$g^{(i)ij}(q) D_k^{(i)} A_j^{(i)}(q) = D_k^{(i)} \{g^{(i)ij}(q) A_j^{(i)}(q)\}, \quad (\text{B.29})$$

$$g_{ij}^{(i)}(q) D_k^{(i)} A^{(i)j}(q) = D_k^{(i)} \{g_{ij}^{(i)}(q) A^{(i)j}(q)\}, \quad (\text{B.30})$$

so daß nach (B.13) und (B.21) die kovariante Ableitung  $D_i^{(i)}$  der ko- und der kontravarianten Metrik verschwinden muß:

$$D_i^{(i)} g^{(i)jk}(q) = \partial_i g^{(i)jk}(q) + \Gamma_{il}^{(i)j}(q) g^{(i)lk}(q) + \Gamma_{il}^{(i)k}(q) g^{(i)jl}(q) = 0, \quad (\text{B.31})$$

$$D_i^{(i)} g_{jk}^{(i)}(q) = \partial_i g_{jk}^{(i)}(q) - \Gamma_{ij}^{(i)l}(q) g_{lk}^{(i)}(q) - \Gamma_{ik}^{(i)l}(q) g_{jl}^{(i)}(q) = 0. \quad (\text{B.32})$$

Nach (B.7), (B.13), (B.21), (B.27) und (B.28) transformiert sich die kovariante Ableitung der ko- und der kontravarianten Metrik wie ein Tensor dritter Stufe:

$$D_\lambda^{(f)} g^{(f)\mu\nu}(Q) = e^i{}_\lambda(Q) e_j{}^\mu(Q) e_k{}^\nu(Q) D_i^{(i)} g^{(i)jk}(q(Q)), \quad (\text{B.33})$$

$$D_\lambda^{(f)} g_{\mu\nu}^{(f)}(Q) = e^i{}_\lambda(Q) e_j{}^\mu(Q) e_k{}^\nu(Q) D_i^{(i)} g_{jk}^{(i)}(q(Q)). \quad (\text{B.34})$$

Aus (B.31)–(B.34) geht dann hervor, daß eine Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit sowohl durch eine integrable als auch durch eine nichtintegrable Koordinatentransformation (B.1) wieder in eine Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit überführt wird. Außerdem zeigt die Bedingung (B.32) mit Hilfe einer zyklischen Vertauschung der drei Indizes  $i, j, k$ , daß sich der affine Zusammenhang  $\Gamma_{jk}^{(i)i}(q)$  einer Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit wie folgt zerlegen läßt:

$$\Gamma_{jk}^{(i)i}(q) = \gamma_{jk}^{(i)i}(q) + K_{jk}^{(i)i}(q). \quad (\text{B.35})$$

Hierbei ist das Christoffel-Symbol zweiter Art

$$\gamma_{jk}^{(i)i}(q) = g^{(i)il}(q) \gamma_{jkl}^{(i)}(q) \quad (\text{B.36})$$

über das Christoffel-Symbol erster Art

$$\gamma_{jkl}^{(i)}(q) = \frac{1}{2} \{ \partial_j g_{kl}^{(i)}(q) + \partial_k g_{lj}^{(i)}(q) - \partial_l g_{jk}^{(i)}(q) \} \quad (\text{B.37})$$

durch die Metriken festgelegt und besitzt wegen (B.22) die Symmetrie

$$\gamma_{jk}^{(i)i}(q) = \gamma_{kj}^{(i)i}(q). \quad (\text{B.38})$$

Demgegenüber setzt sich der Kontortionstensor

$$K_{jk}^{(i)i}(q) = g^{(i)il}(q) K_{jkl}^{(i)}(q) \quad (\text{B.39})$$

aus dem Cartanschen Torsionstensor zusammen

$$K_{jki}^{(i)}(q) = S_{jki}^{(i)}(q) - S_{klj}^{(i)}(q) + S_{ljk}^{(i)}(q) \quad (\text{B.40})$$

und weist wegen (B.17) die Symmetrie

$$K_{jkl}^{(i)}(q) = -K_{jlk}^{(i)}(q) \quad (\text{B.41})$$

auf. Aus (B.35) und (B.41) liest man ab, daß zwischen den Kontraktionen des affinen Zusammenhanges  $\Gamma_{jk}^{(i)i}(q)$  und des Christoffel-Symbols zweiter Art  $\gamma_{jk}^{(i)i}(q)$  die folgende allgemeine Beziehung besteht:

$$\Gamma_{ji}^{(i)i}(q) = \gamma_{ji}^{(i)i}(q). \quad (\text{B.42})$$

### B.1.5 Riemann-Mannigfaltigkeit

Eine Riemann-Mannigfaltigkeit stellt eine Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit dar, bei der der affine Zusammenhang  $\Gamma_{jk}^{(i)i}(q)$  bezüglich der beiden unteren Indizes symmetrisch ist:

$$\Gamma_{jk}^{(i)i}(q) = \Gamma_{kj}^{(i)i}(q). \quad (\text{B.43})$$

Nach (B.17), (B.39), (B.40) und (B.43) verschwinden dann der Cartansche Torsionstensor und der Kontortionstensor

$$S_{jk}^{(i)i}(q) = K_{jk}^{(i)i}(q) = 0, \quad (\text{B.44})$$

so daß der affine Zusammenhang wegen (B.35) mit dem Christoffel-Symbol zweiter Art zusammenfällt:

$$\Gamma_{jk}^{(i)i}(q) = \gamma_{jk}^{(i)i}(q). \quad (\text{B.45})$$

Aus (B.8), (B.16) und (B.43) folgt, daß eine Riemann-Mannigfaltigkeit durch eine integrable Koordinatentransformation (B.1) wieder in eine Riemann-Mannigfaltigkeit übergeht. Demgegenüber bewirkt aber eine nichtintegrable Koordinatentransformation (B.1), daß eine Riemann-Mannigfaltigkeit in eine Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit überführt wird.

### B.1.6 Cartanscher Krümmungstensor

Der Kommutator zweier kovarianter Ableitungen eines ko- oder kontravarianten Vektors ergibt sich unmittelbar aus den beiden Definitionen (B.13) und (B.21):

$$\{D_i^{(i)} D_j^{(i)} - D_j^{(i)} D_i^{(i)}\} A_k^{(i)}(q) = -R_{ijk}^{(i)l}(q) A_l^{(i)}(q) - 2S_{ij}^{(i)l}(q) D_l^{(i)} A_k^{(i)}(q), \quad (\text{B.46})$$

$$\{D_i^{(i)} D_j^{(i)} - D_j^{(i)} D_i^{(i)}\} A^{(i)k}(q) = +R_{ijl}^{(i)k}(q) A^{(i)l}(q) - 2S_{ij}^{(i)l}(q) D_l^{(i)} A^{(i)k}(q). \quad (\text{B.47})$$

Dabei tritt neben dem Cartanschen Torsionstensor  $S_{ij}^{(i)k}(q)$  aus (B.17) die neue Größe

$$R_{ijk}^{(i)l}(q) = \partial_i \Gamma_{jk}^{(i)l}(q) - \partial_j \Gamma_{ik}^{(i)l}(q) + \Gamma_{jk}^{(i)m}(q) \Gamma_{im}^{(i)l}(q) - \Gamma_{ik}^{(i)m}(q) \Gamma_{jm}^{(i)l}(q) \quad (\text{B.48})$$

auf. Sie charakterisiert die differentialgeometrische Eigenschaft der Mannigfaltigkeit, daß ihre infinitesimalen Parallelogramme gekrümmt sein können. Man bezeichnet  $R_{ijk}^{(i)l}(q)$  als Cartanschen Krümmungstensor, obwohl sein Transformationsverhalten nach (B.16) und (B.48) von dem eines Tensors vierter Stufe abweicht:

$$\begin{aligned} R_{\lambda\mu\nu}^{(f)\kappa}(Q) &= e^i{}_\lambda(Q) e^j{}_\mu(Q) e^k{}_\nu(Q) e_l{}^\kappa(Q) R_{ijk}^{(i)l}(q(Q)) + e_i{}^\kappa(Q) \{ \partial_\lambda \partial_\mu e^i{}_\nu(Q) \\ &- \partial_\mu \partial_\lambda e^i{}_\nu(Q) \} + \{ \partial_\lambda e^j{}_\mu(Q) - \partial_\mu e^j{}_\lambda(Q) \} e^k{}_\nu(Q) e_i{}^\kappa(Q) \Gamma_{jk}^{(i)i}(q(Q)). \end{aligned} \quad (\text{B.49})$$

Nur bei integrierbaren Koordinatentransformationen transformiert sich  $R_{ijk}^{(i)l}(q)$  aufgrund der Integrierbarkeitseigenschaft (B.8) wie ein Tensor vierter Stufe. Entsprechendes gilt für die Kontraktion des Cartanschen Krümmungstensors, den sogenannten Ricci-Tensor

$$R_{jk}^{(i)}(q) = R_{ijk}^{(i)i}(q) \quad (\text{B.50})$$

und den durch eine weitere Kontraktion abgeleiteten Cartanschen Krümmungsskalar

$$R^{(i)}(q) = g^{(i)jk}(q) R_{jk}^{(i)}(q). \quad (\text{B.51})$$

Im Falle einer Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit führt die Zerlegung (B.35) des affinen Zusammenhanges  $\Gamma_{jk}^{(i)i}(q)$  in das Christoffel-Symbol zweiter Art  $\gamma_{jk}^{(i)i}(q)$  und den Kontortionstensor  $K_{jk}^{(i)i}(q)$  zu einer Zerlegung des Cartanschen Krümmungstensors (B.48):

$$\begin{aligned} R_{ijkl}^{(i)}(q) &= r_{ijkl}^{(i)}(q) + \partial_i K_{jkl}^{(i)}(q) - \partial_j K_{ikl}^{(i)}(q) \\ &+ g^{(i)mn}(q) \{ K_{ikm}^{(i)}(q) K_{jln}^{(i)}(q) - K_{ilm}^{(i)}(q) K_{jkn}^{(i)}(q) + K_{ikm}^{(i)}(q) \gamma_{jln}^{(i)i}(q) \\ &- K_{ilm}^{(i)}(q) \gamma_{jkn}^{(i)i}(q) + \gamma_{ikm}^{(i)i}(q) K_{jln}^{(i)}(q) - \gamma_{ilm}^{(i)i}(q) K_{jkn}^{(i)}(q) \}. \end{aligned} \quad (\text{B.52})$$

Hierbei stellt  $r_{ijkl}^{(i)}(q)$  den Riemannschen Krümmungstensor dar, der analog zu (B.48) aus dem Christoffel-Symbol zweiter Art  $\gamma_{jk}^{(i)i}(q)$  gebildet wird:

$$r_{ijk}^{(i)l}(q) = \partial_i \gamma_{jk}^{(i)l}(q) - \partial_j \gamma_{ik}^{(i)l}(q) + \gamma_{jk}^{(i)m}(q) \gamma_{im}^{(i)l}(q) - \gamma_{ik}^{(i)m}(q) \gamma_{jm}^{(i)l}(q). \quad (\text{B.53})$$

Wie in (B.50) und (B.51) führt dann die erste Kontraktion auf den Ricci-Tensor

$$r_{jk}^{(i)}(q) = r_{ijk}^{(i)i}(q) \quad (\text{B.54})$$

und die zweite Kontraktion auf den Riemannschen Krümmungsskalar

$$r^{(i)}(q) = g^{(i)jk}(q) r_{jk}^{(i)}(q). \quad (\text{B.55})$$

Verwendet man die Definition des Christoffel-Symbols zweiter Art aus (B.36) und (B.37), dann erhält man für den Riemannschen Krümmungstensor (B.53) den Ausdruck

$$\begin{aligned} r_{ijkl}^{(i)}(q) &= \frac{1}{2} \left\{ \partial_i \partial_k g_{jl}^{(i)}(q) + \partial_j \partial_l g_{ik}^{(i)}(q) - \partial_i \partial_l g_{jk}^{(i)}(q) - \partial_j \partial_k g_{il}^{(i)}(q) \right\} \\ &\quad + g^{(i)mn}(q) \left\{ \gamma_{ikm}^{(i)}(q) \gamma_{jln}^{(i)}(q) - \gamma_{ilm}^{(i)}(q) \gamma_{jkn}^{(i)}(q) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.56})$$

Hieraus lassen sich unter Berücksichtigung der Symmetrien (B.22), (B.23) und (B.38) unmittelbar die folgenden algebraischen Identitäten des Riemannschen Krümmungstensors ablesen:

$$r_{ijkl}^{(i)}(q) = -r_{jikl}^{(i)}(q) = -r_{ijlk}^{(i)}(q) = +r_{klij}^{(i)}(q), \quad (\text{B.57})$$

$$r_{ijkl}^{(i)}(q) + r_{iklj}^{(i)}(q) + r_{iljk}^{(i)}(q) = 0. \quad (\text{B.58})$$

Nach (B.23), (B.54) und (B.57) ist dann der Ricci-Tensor zum Riemannschen Krümmungstensor symmetrisch:

$$r_{jk}^{(i)}(q) = r_{kj}^{(i)}(q). \quad (\text{B.59})$$

Demgegenüber besitzt der Cartansche Krümmungstensor nach (B.38), (B.41), (B.52) und (B.57) lediglich die beiden algebraischen Identitäten

$$R_{ijkl}^{(i)}(q) = -R_{jikl}^{(i)}(q) = -R_{ijlk}^{(i)}(q), \quad (\text{B.60})$$

so daß dessen Ricci-Tensor  $R_{jk}^{(i)}(q)$  im allgemeinen nicht symmetrisch ist. Abschließend ist festzuhalten, daß bei einer Riemann-Mannigfaltigkeit beide Krümmungstensoren wegen (B.44) und (B.52) zusammenfallen:

$$R_{ijkl}^{(i)}(q) = r_{ijkl}^{(i)}(q). \quad (\text{B.61})$$

## B.2 Nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation

In diesem Abschnitt werden eingehend die differentialgeometrischen Konsequenzen nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen untersucht. Geht man von der einfachst möglichen Annahme aus, daß die Raum-Zeit vor der Transformation eine Riemann-Mannigfaltigkeit darstellt, so erhält die Raum-Zeit durch (1.19) und (1.20) die Struktur einer Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit. Dabei kann im einzelnen berechnet werden, welche Krümmung und welche Torsion durch die nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation (1.19) und (1.20) erzeugt wird.

### B.2.1 Einbettung

Eine  $D$ -dimensionale räumliche Riemann-Mannigfaltigkeit läßt sich in eine  $D + 1$ -dimensionale Mannigfaltigkeit der Raum-Zeit einbetten (vgl. Anhang A). Hierzu werden die  $D$  Raumkoordinaten  $q^i$  mit  $i = 1, \dots, D$  nach Dirac um die Zeitkoordinate  $t$  zu  $D + 1$  Raum-Zeit-Koordinaten  $\bar{q}^a$  mit  $a = 0, 1, \dots, D$  ergänzt:

$$\bar{q}^a = \begin{cases} t & ; a = 0, \\ q^i & ; a = i = 1, \dots, D. \end{cases} \quad (\text{B.62})$$

Da die nichtrelativistischen Bewegungsgleichungen sowohl in der klassischen Mechanik (vgl. Kapitel 2) als auch in der Quantenmechanik (vgl. Kapitel 3) nur von den Metriken  $g_{ij}^{(i)}(q)$  und  $g^{(i)ij}(q)$  der  $D$ -dimensionalen räumlichen Riemann-Mannigfaltigkeit abhängen, liegt die differentialgeometrische Struktur der  $D + 1$ -dimensionalen Mannigfaltigkeit der Raum-Zeit a priori nicht fest. Im Rahmen einer nichtrelativistischen Untersuchung soll deshalb von der einfachst möglichen Annahme ausgegangen werden, daß die durch Einbettung entstehende Mannigfaltigkeit der Raum-Zeit eine Riemannsche Struktur besitzt und daß deren Metriken  $\bar{g}_{ab}^{(i)}(\bar{q})$ ,  $\bar{g}^{(i)ab}(\bar{q})$  gegeben sind durch

$$\begin{pmatrix} \bar{g}_{00}^{(i)}(\bar{q}) & \bar{g}_{0j}^{(i)}(\bar{q}) \\ \bar{g}_{i0}^{(i)}(\bar{q}) & \bar{g}_{ij}^{(i)}(\bar{q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & g_{ij}^{(i)}(q) \end{pmatrix}, \quad (\text{B.63})$$

$$\begin{pmatrix} \bar{g}^{(i)00}(\bar{q}) & \bar{g}^{(i)0j}(\bar{q}) \\ \bar{g}^{(i)i0}(\bar{q}) & \bar{g}^{(i)ij}(\bar{q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & g^{(i)ij}(q) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.64})$$

Gemäß (B.36), (B.37) und (B.45) ist dann der affine Zusammenhang  $\bar{\Gamma}_{ab}^{(i)c}(\bar{q})$  durch die Metriken (B.63) und (B.64) festgelegt:

$$\begin{pmatrix} \bar{\Gamma}_{00}^{(i)0}(\bar{q}) & \bar{\Gamma}_{0j}^{(i)0}(\bar{q}) \\ \bar{\Gamma}_{00}^{(i)k}(\bar{q}) & \bar{\Gamma}_{0j}^{(i)k}(\bar{q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.65})$$

$$\begin{pmatrix} \bar{\Gamma}_{i0}^{(i)0}(\bar{q}) & \bar{\Gamma}_{ij}^{(i)0}(\bar{q}) \\ \bar{\Gamma}_{i0}^{(i)k}(\bar{q}) & \bar{\Gamma}_{ij}^{(i)k}(\bar{q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \Gamma_{ij}^{(i)k}(q) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.66})$$

Hieraus resultieren die differentialgeometrischen Eigenschaften der Raum-Zeit, daß der Cartansche Torsionstensor  $\bar{S}_{ab}^{(i)c}(\bar{q})$  nach (B.44) verschwindet und daß der Cartansche Krümmungstensor  $\bar{R}_{abc}^{(i)d}(\bar{q})$  nach (B.61) mit dem Riemannschen Krümmungstensor  $\bar{r}_{abc}^{(i)d}(\bar{q})$  übereinstimmt. Aus (B.48), (B.50), (B.57), (B.65) und (B.66) bestimmt sich der Ricci-Tensor  $\bar{R}_{ab}^{(i)}(\bar{q})$  unmittelbar zu

$$\begin{pmatrix} \bar{R}_{00}^{(i)}(\bar{q}) & \bar{R}_{0j}^{(i)}(\bar{q}) \\ \bar{R}_{i0}^{(i)}(\bar{q}) & \bar{R}_{ij}^{(i)}(\bar{q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & R_{ij}^{(i)}(q) \end{pmatrix}, \quad (\text{B.67})$$

so daß der Cartansche Krümmungsskalar  $\bar{R}^{(i)}(\bar{q})$  der Raum-Zeit nach (B.51) mit dem räumlichen Cartanschen Krümmungsskalar  $R^{(i)}(q)$  identisch ist:

$$\bar{R}^{(i)}(\bar{q}) = R^{(i)}(q). \quad (\text{B.68})$$

## B.2.2 $D + 1$ -Bein und reziprokes $D + 1$ -Bein

Führt man eine Raum-Zeit-Transformation durch, so lassen sich auch die neue Zeitkoordinate  $s$  und die  $D$  neuen Raumkoordinaten  $Q^\lambda$  mit  $\lambda = 1, \dots, D$  nach Dirac zu  $D + 1$  Raum-Zeit-Koordinaten

$$\bar{Q}^\alpha = \begin{cases} s & ; \alpha = 0, \\ Q^\lambda & ; \alpha = \lambda = 1, \dots, D \end{cases} \quad (\text{B.69})$$

zusammenfassen. Dabei wird eine solche Raum-Zeit-Transformation analog zu (B.2) durch das  $D + 1$ -Bein  $\bar{e}_\alpha^a(\bar{Q})$  und das reziproke  $D + 1$ -Bein  $\bar{e}_a^\alpha(\bar{Q})$  charakterisiert:

$$d\bar{q}^a = \bar{e}_\alpha^a(\bar{Q}) d\bar{Q}^\alpha, \quad d\bar{Q}^\alpha = \bar{e}_a^\alpha(\bar{Q}) d\bar{q}^a. \quad (\text{B.70})$$

Im Falle der integralen Raumtransformation (1.19) und der nichtintegralen Zeittransformation (1.20) erhält man unter Beachtung der Definitionen (B.62) und (B.69) für das  $D + 1$ -Bein

$$\begin{pmatrix} \bar{e}_0^0(\bar{Q}) & \bar{e}_\lambda^0(\bar{Q}) \\ \bar{e}_0^i(\bar{Q}) & \bar{e}_\lambda^i(\bar{Q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(Q) & 0 \\ 0 & e^i_\lambda(Q) \end{pmatrix} \quad (\text{B.71})$$

und für das reziproke  $D + 1$ -Bein

$$\begin{pmatrix} \bar{e}_0^0(\bar{Q}) & \bar{e}_i^0(\bar{Q}) \\ \bar{e}_0^\lambda(\bar{Q}) & \bar{e}_i^\lambda(\bar{Q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{f(Q)} & 0 \\ 0 & e_i^\lambda(Q) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.72})$$

Insgesamt gesehen handelt es sich um eine nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation, da das  $D + 1$ -Bein  $\bar{e}_\alpha^a(\bar{Q})$  für  $a = 0$  nicht der Schwarzschen Integritätsbedingung [8, S. 568], [66, S. 385] genügt:

$$\bar{\partial}_\lambda \bar{e}_0^0(\bar{Q}) - \bar{\partial}_0 \bar{e}_\lambda^0(\bar{Q}) = \partial_\lambda f(Q). \quad (\text{B.73})$$

Nach Abschnitt B.1.5 hat eine solche nichtintegrale Raum-Zeit-Transformation zur Folge, daß die in Abschnitt B.2.1 eingeführte Riemann-Mannigfaltigkeit der Raum-Zeit in eine Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit übergeht. Dies wird im folgenden näher untersucht.

### B.2.3 Transformation der Metriken

Die beiden Metriken  $\bar{g}_{ab}^{(i)}(\bar{q})$  und  $\bar{g}^{(i)ab}(\bar{q})$  transformieren sich nach (B.27) und (B.28) wie Tensoren zweiter Stufe. Aus (B.63), (B.64), (B.71) und (B.72) ergeben sich demnach die transformierten Metriken  $\bar{g}_{\alpha\beta}^{(f)}(\bar{Q})$  und  $\bar{g}^{(f)\alpha\beta}(\bar{Q})$  zu

$$\begin{pmatrix} \bar{g}_{00}^{(f)}(\bar{Q}) & \bar{g}_{0\mu}^{(f)}(\bar{Q}) \\ \bar{g}_{\lambda 0}^{(f)}(\bar{Q}) & \bar{g}_{\lambda\mu}^{(f)}(\bar{Q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(Q)^2 & 0 \\ 0 & g_{\lambda\mu}^{(1)}(Q) \end{pmatrix}, \quad (\text{B.74})$$

$$\begin{pmatrix} \bar{g}^{(f)00}(\bar{Q}) & \bar{g}^{(f)0\mu}(\bar{Q}) \\ \bar{g}^{(f)\lambda 0}(\bar{Q}) & \bar{g}^{(f)\lambda\mu}(\bar{Q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{f(Q)^2} & 0 \\ 0 & g^{(1)\lambda\mu}(Q) \end{pmatrix}, \quad (\text{B.75})$$

wobei

$$g_{\lambda\mu}^{(1)}(Q) = e_i^\lambda(Q) e_j^\mu(Q) g_{ij}^{(i)}(q(Q)), \quad (\text{B.76})$$

$$g^{(1)\lambda\mu}(Q) = e_i^\lambda(Q) e_j^\mu(Q) g^{(i)ij}(q(Q)) \quad (\text{B.77})$$

die beiden transformierten räumlichen Metriken darstellen. Hieraus bestimmt sich das Christoffel-Symbol zweiter Art  $\bar{\gamma}_{\alpha\beta}^{(f)\gamma}(\bar{Q})$  gemäß (B.36) und (B.37):

$$\begin{pmatrix} \bar{\gamma}_{00}^{(f)0}(\bar{Q}) & \bar{\gamma}_{0\lambda}^{(f)0}(\bar{Q}) \\ \bar{\gamma}_{00}^{(f)\mu}(\bar{Q}) & \bar{\gamma}_{0\lambda}^{(f)\mu}(\bar{Q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial_\lambda f(Q)}{f(Q)} \\ -g^{(1)\mu\nu}(Q) f(Q) \partial_\nu f(Q) & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.78})$$

$$\begin{pmatrix} \bar{\gamma}_{\lambda 0}^{(f)0}(\bar{Q}) & \bar{\gamma}_{\lambda\mu}^{(f)0}(\bar{Q}) \\ \bar{\gamma}_{\lambda 0}^{(f)\nu}(\bar{Q}) & \bar{\gamma}_{\lambda\mu}^{(f)\nu}(\bar{Q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial_\lambda f(Q)}{f(Q)} & 0 \\ 0 & \Gamma_{\lambda\mu}^{(1)\nu}(Q) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.79})$$

Der Riemannsche Krümmungstensor  $\bar{r}_{\alpha\beta\gamma}^{(f)\delta}(\bar{Q})$  läßt sich dann nach (B.53) unter Ausnutzung der algebraischen Identitäten (B.57) berechnen. Dabei lauten die nichtverschwindenden Tensorelemente

$$\bar{r}_{0\lambda 0}^{(f)\mu}(\bar{Q}) = -\bar{r}_{\lambda 0 0}^{(f)\mu}(\bar{Q}) = g^{(1)\mu\nu}(Q)f(Q)\partial_\lambda\partial_\nu f(Q) - \Gamma_\lambda^{(1)\mu\nu}(Q)f(Q)\partial_\nu f(Q), \quad (\text{B.80})$$

$$\bar{r}_{0\lambda\mu}^{(f)0}(\bar{Q}) = -\bar{r}_{\lambda 0\mu}^{(f)0}(\bar{Q}) = \Gamma_{\lambda\mu}^{(1)\nu}(Q)\frac{\partial_\nu f(Q)}{f(Q)} - \frac{\partial_\lambda\partial_\mu f(Q)}{f(Q)}, \quad (\text{B.81})$$

$$\bar{r}_{\lambda\mu\nu}^{(f)\kappa}(\bar{Q}) = R_{\lambda\mu\nu}^{(1)\kappa}(Q). \quad (\text{B.82})$$

Eine erste Kontraktion des Riemannschen Krümmungstensors  $\bar{r}_{\alpha\beta\gamma}^{(f)\delta}(\bar{Q})$  analog zu (B.54) führt auf den Ricci-Tensor

$$\bar{r}_{00}^{(f)}(\bar{Q}) = \Gamma_\nu^{(1)\nu\kappa}(Q)f(Q)\partial_\kappa f(Q) - g^{(1)\nu\kappa}(Q)f(Q)\partial_\nu\partial_\kappa f(Q), \quad (\text{B.83})$$

$$\bar{r}_{0\lambda}^{(f)}(\bar{Q}) = \bar{r}_{\lambda 0}^{(f)}(\bar{Q}) = 0, \quad (\text{B.84})$$

$$\bar{r}_{\lambda\mu}^{(f)}(\bar{Q}) = R_{\lambda\mu}^{(1)}(Q) + \Gamma_{\lambda\mu}^{(1)\nu}(Q)\frac{\partial_\nu f(Q)}{f(Q)} - \frac{\partial_\lambda\partial_\mu f(Q)}{f(Q)} \quad (\text{B.85})$$

und eine zweite Kontraktion entsprechend zu (B.55) auf den Riemannschen Krümmungsskalar

$$\bar{r}^{(f)}(\bar{Q}) = R^{(1)}(Q) + 2\Gamma_\lambda^{(1)\lambda\mu}(Q)\frac{\partial_\mu f(Q)}{f(Q)} - 2g^{(1)\lambda\mu}(Q)\frac{\partial_\lambda\partial_\mu f(Q)}{f(Q)}. \quad (\text{B.86})$$

## B.2.4 Transformation des affinen Zusammenhanges

Transformiert man den affinen Zusammenhang (B.65), (B.66) mit dem  $D+1$ -Bein (B.71) und dem reziproken  $D+1$ -Bein (B.72) gemäß (B.16), so erhält man

$$\begin{pmatrix} \bar{\Gamma}_{00}^{(f)0}(\bar{Q}) & \bar{\Gamma}_{0\lambda}^{(f)0}(\bar{Q}) \\ \bar{\Gamma}_{00}^{(f)\mu}(\bar{Q}) & \bar{\Gamma}_{0\lambda}^{(f)\mu}(\bar{Q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.87})$$

$$\begin{pmatrix} \bar{\Gamma}_{\lambda 0}^{(f)0}(\bar{Q}) & \bar{\Gamma}_{\lambda\mu}^{(f)0}(\bar{Q}) \\ \bar{\Gamma}_{\lambda 0}^{(f)\nu}(\bar{Q}) & \bar{\Gamma}_{\lambda\mu}^{(f)\nu}(\bar{Q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial_\lambda f(Q)}{f(Q)} & 0 \\ 0 & \Gamma_{\lambda\mu}^{(1)\nu}(Q) \end{pmatrix}. \quad (\text{B.88})$$

Dabei kann explizit nachgeprüft werden, daß die Metriken (B.74), (B.75) und der affine Zusammenhang (B.87), (B.88) tatsächlich die Kompatibilitätsbedingungen (B.31), (B.32) einer Riemann-Cartan-Mannigfaltigkeit erfüllen. Außerdem besteht zwischen dem Christoffel-Symbol zweiter Art (B.78), (B.79) und dem affinen Zusammenhang (B.87), (B.88) eine zu (B.42) analoge Beziehung. Nach (B.17), (B.19),



(B.87) und (B.88) ist der Cartansche Torsionsvektor  $\overline{S}_\alpha^{(f)}(\overline{Q})$  gegeben durch

$$\overline{S}_0^{(f)}(\overline{Q}) = 0, \quad \overline{S}_\lambda^{(f)}(\overline{Q}) = \frac{\partial_\lambda f(Q)}{f(Q)}, \quad (\text{B.89})$$

so daß man für den Cartanschen Torsionsskalar

$$\overline{S}^{(f)}(\overline{Q}) = \overline{g}^{(f)\alpha\beta}(\overline{Q}) \overline{S}_\alpha^{(f)}(\overline{Q}) \overline{S}_\beta^{(f)}(\overline{Q}) \quad (\text{B.90})$$

das folgende Ergebnis erhält:

$$\overline{S}^{(f)}(\overline{Q}) = g^{(1)\lambda\mu}(Q) \frac{\partial_\lambda \partial_\mu f(Q)}{4f(Q)^2}. \quad (\text{B.91})$$

Andererseits ergibt sich aus (B.48), (B.50), (B.60), (B.87) und (B.88) der Ricci-Tensor des Cartanschen Krümmungstensors zu

$$\begin{pmatrix} \overline{R}_{00}^{(f)}(\overline{Q}) & \overline{R}_{0\mu}^{(f)}(\overline{Q}) \\ \overline{R}_{\lambda 0}^{(f)}(\overline{Q}) & \overline{R}_{\lambda\mu}^{(f)}(\overline{Q}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & R_{\lambda\mu}^{(1)}(Q) \end{pmatrix} \quad (\text{B.92})$$

und die Kontraktion (B.51) führt schließlich auf den Cartanschen Krümmungsskalar

$$\overline{R}^{(f)}(\overline{Q}) = R^{(1)}(Q). \quad (\text{B.93})$$

### B.3 Differentialgeometrische Interpretation

Die im vorangegangenen Abschnitt untersuchten differentialgeometrischen Konsequenzen nichtintegrierbarer Raum-Zeit-Transformationen lassen sich in Anlehnung an die Arbeiten [100, 101] zur Interpretation eines früheren Ergebnisses heranziehen. In Kapitel 3 führt die Invarianz der Quantenmechanik unter (1.19) und (1.20) zu einer Transformationsvorschrift (3.171) zwischen dem skalaren Potential des Ausgangssystems  $V^{(i)}(q)$  und dem des Endsystems  $V^{(f)}(Q)$ , die aus einer nullten und einer zweiten Ordnung im Planckschen Wirkungsquantum  $\hbar = 2\pi\hbar$  besteht. Während die nullte Ordnung mit dem entsprechenden klassischen Resultat (2.81) von Kapitel 2 übereinstimmt, blieb eine Interpretation der zweiten Ordnung bisher offen. Spaltet man nun die Metrik  $g^{(f)\lambda\mu}(Q)$  und die Kontraktion des affinen Zusammenhanges  $\Gamma_\lambda^{(f)\lambda\mu}(Q)$  gemäß (3.48) und (3.50) in die Auswirkungen der integrierbaren Raumtransformation (1.19) und der nichtintegrierbaren Zeittransformation (1.20) auf, so geht (3.171) über in

$$V^{(f)}(Q) = f(Q) \left\{ V^{(i)}(q(Q)) - E^{(i)} + \frac{\hbar^2}{m} \left[ \frac{4 - D^2}{32} g^{(1)\lambda\mu}(Q) \frac{\partial_\lambda f(Q) \partial_\mu f(Q)}{f(Q)^2} \right. \right.$$

$$+ \frac{D-2}{8} \left( g^{(1)\lambda\mu}(Q) \frac{\partial_\lambda \partial_\mu f(Q)}{f(Q)} - \Gamma_\lambda^{(1)\lambda\mu}(Q) \frac{\partial_\mu f(Q)}{f(Q)} \right) \Big] \Big\} . \quad (\text{B.94})$$

Vergleicht man die quantenmechanischen Korrekturterme in (B.94) mit dem Riemannschen Krümmungsskalar (B.86), dem Cartanschen Torsionsskalar (B.91) und dem Cartanschen Krümmungsskalar (B.93), so liegt die folgende differentialgeometrische Interpretation nahe:

$$V^{(f)}(Q) = f(Q) \left\{ V^{(i)}(q(Q)) - E^{(i)} + \frac{\hbar^2}{m} \left[ \frac{4-D^2}{8} \bar{S}^{(f)}(\bar{Q}) + \frac{D-2}{16} \left( \bar{R}^{(f)}(\bar{Q}) - \bar{r}^{(f)}(\bar{Q}) \right) \right] \right\} . \quad (\text{B.95})$$

Ein klassisches Teilchen, das nur einen eindeutigen Weg in der Raum-Zeit durchläuft, wird demnach nicht durch die differentialgeometrischen Eigenschaften der Raum-Zeit beeinflusst. Demgegenüber durchläuft ein quantenmechanisches Teilchen nach Feynman [32, 33, 34, 35] alle möglichen Wege in der Raum-Zeit, so daß dessen Potential gemäß (B.95) von der Krümmung und der Torsion der Raum-Zeit beeinflusst wird.



# Bibliographie

- [1] A.O. Barut: *Die Theorie der Streumatrix I*; Bibliographisches Institut (1971)
- [2] A.O. Barut: *Dynamical Groups and Generalized Symmetries in Quantum Theory – With Applications in Atomic Particle Physics*; Lectures given at the University of Canterbury, Christchurch New Zealand, July – August (1971); University of Canterbury (1972)
- [3] A.O. Barut, R. Raczka: *Theory of Group Representations and Applications*; Polish Scientific Publishers (1977)
- [4] L.C. Biedenharn: *Remarks on the Relativistic Kepler Problem*; Phys. Rev. **126**, 845–851 (1962)
- [5] A.M. Bloch, P.S. Krishnaprasad, J.E. Marsden, R.M. Murray: *Nonholonomic Mechanical Systems with Symmetry*; Archive for Rational Mechanics and Analysis; to appear
- [6] D.I. Blochinzew: *Grundlagen der Quantenmechanik*; Verlag Harri Deutsch, 8. Auflage (1985)
- [7] A. Bottino, A.M. Longoni, T. Regge: *Potential Scattering for Complex Energy and Angular Momentum*; N. Cim. **23**, 954–1004 (1962)
- [8] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew: *Taschenbuch der Mathematik*; Verlag Harri Deutsch, 24. Auflage (1989)
- [9] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew: *Ergänzende Kapitel zum Taschenbuch der Mathematik*; Verlag Harri Deutsch, 5. bearbeitete und erweiterte Auflage (1988)
- [10] H. Buchholz: *Die Konfluente Hypergeometrische Funktion – Mit Besonderer Berücksichtigung Ihrer Anwendungen*; Springer-Verlag (1953)
- [11] P.Y. Cai, A. Inomata, P. Wang: *Jackiw Transformation in Path Integrals*; Phys. Lett. **91**, 331–334 (1982)

- [12] P.Y. Cai, A. Inomata, R. Wilson: *Path-Integral Treatment of the Morse Oscillator*; Phys. Lett. **A 96**, 117–120 (1983)
- [13] A.I. Cardoso, M. de Faria, J. Potthoff, R. Sénéor, L. Streit (Editors): *Stochastic Analysis and Applications in Physics*; NATO ASI Series C, Vol. 449 (1994)
- [14] G. Casati, B. Chirikov (Editors): *Quantum Chaos – Between Order and Disorder*; Cambridge University Press (1995)
- [15] L. Collatz: *Differentialgleichungen – Eine Einführung unter Besonderer Berücksichtigung der Anwendungen*; Teubner-Verlag (1981)
- [16] F.H.J. Cornish: *Kepler Orbits and the Harmonic Oscillator*; J. Phys. **A 17**, 2191–2197 (1984)
- [17] R. De, R. Dutt, U. Sukhatme: *Mapping of Shape Invariant Potentials Under Point Canonical Transformations*; J. Phys. **A 25**, L843–L850 (1992)
- [18] B.S. DeWitt: *Dynamical Theory in Curved Spaces – I. A Review of the Classical and Quantum Action Principles*; Rev. Mod. Phys. **29**, 377–397 (1957)
- [19] P.A.M. Dirac: *Homogeneous Variables in Classical Dynamics*; Proc. Camb. Phil. Soc. **29**, 389–400 (1933)
- [20] P.A.M. Dirac: *The Lagrangian in Quantum Mechanics*; Phys. Z. Sowj. **3**, 64–72 (1933)
- [21] P.A.M. Dirac: *On the Analogy Between Classical and Quantum Mechanics*; Rev. Mod. Phys. **17**, 195–199 (1945)
- [22] P.A.M. Dirac: *Generalized Hamiltonian Dynamics*; Can. J. Math. **2**, 129–148 (1950)
- [23] V.V. Dodonov, V.I. Man’ko: *Invariants and Evolution of Nonstationary Quantum Systems*; Editor M.A. Markov, English Edition by Nova Science (1989), Russian Edition by Nauka (1987)
- [24] J.C. D’Olivo, M. Torres: *The Canonical Formalism and Path Integrals in Curved Spaces*; J. Phys. **A 21**, 3355–3363 (1988)
- [25] I.H. Duru, H. Kleinert: *Solution of the Path Integral for the H-Atom*; Phys. Lett. **B 84**, 185–188 (1979)
- [26] I.H. Duru, H. Kleinert: *Quantum Mechanics of H-Atom from Path Integrals*; Fortschr. Phys. **30**, 401–435 (1982)
- [27] I.H. Duru: *Morse-Potential Green’s Function with Path Integrals*; Phys. Rev. **D 28**, 2689–2692 (1983)

- [28] I.H. Duru: *On the Path Integral for the Potential  $V = a \cdot r^{-2} + b \cdot r^2$* ; Phys. Lett. **A 112**, 421–423 (1985)
- [29] B. Eckhardt, G. Ott: *Periodic Orbit Analysis of the Lorenz Attractor*; Z. Phys. **B 93**, 259–266 (1994)
- [30] P. Ehrenfest: *Adiabatische Invarianten und Quantentheorie*; Ann. Phys. **51**, 326–352 (1916)
- [31] B. Felsager: *Geometry, Particles and Fields*; Odense University Press (1981)
- [32] R.P. Feynman: *Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics*; Rev. Mod. Phys. **20**, 367–387 (1948)
- [33] R.P. Feynman, A.R. Hibbs: *Quantum Mechanics and Path Integrals*; McGraw–Hill Book Company (1965)
- [34] R.P. Feynman: *The Development of the Space-Time View of Quantum Electrodynamics*; Science **153**, 699–708 (1966)
- [35] R.P. Feynman: *QED – The Strange Theory of Light and Matter*; Princeton University Press (1985)
- [36] R.P. Feynman: *Vom Wesen physikalischer Gesetze*; Piper-Verlag, Neuausgabe (1993)
- [37] E. Fick: *Einführung in die Grundlagen der Quantentheorie*; Aula-Verlag, 5. Auflage (1984)
- [38] W. Fischer, J. Leschke, P. Müller: *Changing Dimension and Time: Two Well-Founded and Practical Techniques for Path Integration in Quantum Physics*; J. Phys. **A 25**, 3835–3853 (1992)
- [39] W. Fischer, J. Leschke, P. Müller: *Path Integration in Quantum Mechanics by Changing Drift and Time of the Underlying Diffusion Process*; Proceedings of the *Fourth International Conference on Path Integrals from meV to MeV, Tutzing, Bavaria, May 18 – 21, 1992*; World Scientific, 335–342 (1993)
- [40] P. Fiziev, H. Kleinert: *New Action Principle for Classical Particle Trajectories in Spaces with Torsion*; FU-Berlin preprint (1993)
- [41] P. Fiziev, H. Kleinert: *Euler Equations for Rigid Body – A Case for Autoparallel Trajectories in Spaces with Torsion*; FU-Berlin preprint (1994)
- [42] T. Fließbach: *Allgemeine Relativitätstheorie*; Bibliographisches Institut (1990)

- [43] S. Flügge: *Rechenmethoden der Quantentheorie – Elementare Quantenmechanik Dargestellt in Aufgaben und Lösungen*; Springer-Verlag, 5. verbesserte Auflage (1993)
- [44] H. Friedrich, D. Wintgen: *The Hydrogen Atom in a Uniform Magnetic Field – An Example of Chaos*; Phys. Rep. **183**, 37–79 (1989)
- [45] H. Goldstein: *Klassische Mechanik*; Aula-Verlag, 11. Auflage (1991)
- [46] M. Goodman: *Path Integral Solution to the Infinite Square Well*; Am. J. Phys. **49**, 843–847 (1981)
- [47] W. Gordon: *Zur Theorie der Adiabatischen Invarianten*; Inaugural-Dissertation, Friedrich-Wilhelms-Universität zu Berlin (1921)
- [48] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik: *Table of Integrals, Series and Products – Corrected and Enlarged Edition*; Academic Press (1980)
- [49] W. Greiner, B. Müller: *Quantenmechanik – Teil 2 Symmetrien*; Band V der Reihe *Theoretische Physik*, Verlag Harri Deutsch, 3. überarbeitete und erweiterte Auflage (1990)
- [50] W. Greiner, J. Reinhardt: *Feldquantisierung*; Band VIIA der Reihe *Theoretische Physik*, Verlag Harri Deutsch (1993)
- [51] C. Grosche: *The Path Integral on the Poincaré Upper Half-Plane with a Magnetic Field and for the Morse Potential*; Ann. Phys. **187**, 110–134 (1988)
- [52] C. Grosche: *Path Integral Solution of a Class of Explicitly Time-Dependent Potentials*; Phys. Lett. **A 182**, 28–36 (1993)
- [53] C. Grosche: *Path Integrals, Hyperbolic Spaces and Selberg Trace Formulae*; Habilitationsschrift, Universität Hamburg (1995)
- [54] C. Grosche, F. Steiner: *A Table of Feynman Path Integrals*; Springer Tracts in Modern Physics, to be published
- [55] M.C. Gutzwiller: *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*; Springer-Verlag (1990)
- [56] F. Haake: *Quantum Signatures of Chaos*; Springer-Verlag (1991)
- [57] H. Haken: *Synergetics – An Introduction*; Springer-Verlag, 3. Edition (1983)
- [58] H. Haken: *Advanced Synergetics – Instability Hierarchies of Self-Organizing Systems and Devices*; Springer-Verlag, Corrected 2. Printing (1987)
- [59] H. Haken: *Information and Self-Organization – Macroscopic Approach to Complex Systems*; Springer-Verlag (1988)

- [60] H. Haken, H.C. Wolf: *Molekülphysik und Quantenchemie – Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen*; Springer-Verlag, 2. verbesserte und erweiterte Auflage (1994)
- [61] G. Hamel: *Theoretische Mechanik – Eine einheitliche Einführung in die gesamte Mechanik*; Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, Vol. 57, A Series of Comprehensive Studies in Mathematics; Springer-Verlag, Berichtiger Reprint (1978)
- [62] H. Hasegawa, M. Robnik, G. Wunner: *Classical and Quantal Chaos in the Diamagnetic Kepler Problem*; Prog. Theor. Phys. Suppl. **98**, 198–286 (1989)
- [63] F.W. Hehl: *Spin und Torsion in der Allgemeinen Relativitätstheorie – Die Riemann-Cartansche Geometrie der Welt*; Habilitationsschrift, Clausthal (1970)
- [64] F.W. Hehl, P. von der Heyde, G.D. Kerlick, J.M. Nester: *General Relativity with Spin and Torsion – Foundations and Prospects*; Rev. Mod. Phys. **48**, 393–416 (1976)
- [65] F.W. Hehl, J.D. McCrea, E.W. Mielke, Y. Ne'eman: *Metric-Affine Gauge Theory of Gravity – Field Equations, Noether Identities, World Spinors, and Breaking of Dilation Invariance*; Phys. Rep. **258**, 1–171 (1995)
- [66] H. Heuser: *Lehrbuch der Analysis – Teil 2*; Teubner-Verlag, 3. durchgesehene Auflage (1986)
- [67] T. Hida, H.-H. Hida, J. Potthof, L. Streit: *White Noise – An Infinite Dimensional Calculus*; Kluwer Academic Publisher (1993)
- [68] L. Hostler: *Coulomb Green's Functions and the Furry Approximation*; J. Math. Phys. **5**, 591–611 (1964)
- [69] A. Inomata, H. Kuratsuji, C.C. Gerry: *Path Integrals and Coherent States of  $SU(2)$  and  $SU(1,1)$* ; World Scientific (1992)
- [70] R. d'Inverno: *Einführung in die Relativitätstheorie*; VCH Verlagsgesellschaft (1995)
- [71] W. Janke, H. Kleinert: *Summing Paths for a Particle in a Box*; Lett. N. Cim. **25**, 297–300 (1979)
- [72] G. Junker, A. Inomata: *Transformation of the Free Propagator to the Quadratic Propagator*; Phys. Lett. A **110**, 195–198 (1985)
- [73] G. Junker: *Remarks on the Local Time Rescaling in Path Integration*; J. Phys. Math. A **23**, L881–L884 (1990)



- [74] G. Junker: *Supersymmetric Methods in Quantum and Statistical Physics*; Springer Lecture Notes in Physics, to be published
- [75] M.A. Kayed, A. Inomata: *Exact Path-Integral Solution of the Dirac-Coulomb Problem*; Phys. Rev. Lett. **53**, 107–110 (1984)
- [76] D.C. Khandekar, S.V. Lawande, K.V. Bhagwat: *Path-Integral Methods and Their Applications*; World Scientific (1993)
- [77] U. Kirchgraber, E. Stiefel: *Methoden der Analytischen Störungsrechnung und Ihre Anwendungen*; Teubner-Verlag (1978)
- [78] H. Kleinert: *Group Dynamics of Elementary Particles*; University of Colorado Thesis, Fortschr. Phys. **16**, 1–74 (1968)
- [79] H. Kleinert: *Quantum Mechanics and Path Integrals in Spaces with Curvature and Torsion*; Mod. Phys. Lett. **A 4**, 2329–2337 (1989)
- [80] H. Kleinert: *Gauge Fields in Condensed Matter, Vol. II, Part IV, Differential Geometry of Defects and Gravity*; World Scientific (1989)
- [81] H. Kleinert, I. Mustapic: *Calculation of Pöschl-Teller and Rosen-Morse Fixed Energy Amplitudes in Closed Form*; J. Math. Phys. **33**, 643–662 (1992)
- [82] H. Kleinert: *Pfadintegrale – In Quantenmechanik, Statistik und Polymerphysik*; Bibliographisches Institut (1993)
- [83] H. Kleinert: *Path Integral of Relativistic Coulomb System*; FU-Berlin preprint (1995)
- [84] H. Kleinert, A. Pelster: *Lagrange Mechanics in Spaces with Curvature and Torsion*; FU-Berlin preprint (1996)
- [85] E. Kröner: *Continuum Theory of Defects*; In: R. Balian et al., *Physics of Defects, Les Houches, Session XXXV, 1980*, North-Holland, 215–315 (1981)
- [86] E. Kröner: *The Differential Geometry of Elementary Point and Line Defects in Bravais Crystals*; Intern. J. Theor. Phys. **29**, 1219–1237 (1990)
- [87] P. Kustaanheimo: *Spinor Regularization of the Kepler Motion*; Ann. Univ. Turk. **A 73**, 1–7 (1964)
- [88] P. Kustaanheimo, E. Stiefel: *Perturbation Theory of Kepler Motion Based on Spinor Regularization*; J. Reine Angew. Math. **218**, 204–219 (1965)
- [89] R.E. Langer: *On the Connection Formulas and the Solutions of the Wave Equation*; Phys. Rev. **51**, 669–676 (1937)

- [90] T. Levi-Civita: *Fragen der Klassischen und Relativistischen Mechanik – Vier Vorträge gehalten in Spanien im Januar 1921*; Autorisierte Übersetzung, Reprint, Springer-Verlag (1973)
- [91] A. Lindner: *Grundkurs Theoretische Physik*; Teubner-Verlag (1994)
- [92] P. Mittelstaedt: *Klassische Mechanik*; B.I. Wissenschaftsverlag, 2. überarbeitete und erweiterte Auflage (1995)
- [93] P.M. Morse: *Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics – II. Vibrational Levels*; Phys. Rev. **34**, 57–64 (1929)
- [94] N. Obata: *White Noise Calculus and Fock Space*; Lecture Notes in Mathematics, Vol. 1577, Springer-Verlag (1994)
- [95] K. Pak, I. Sökmen: *A New Exact Path Integral Treatment of the Coulomb and Morse Potential Problems*; Phys. Lett. A **100**, 327–331 (1984)
- [96] D. Peak, A. Inomata: *Summation over Feynman Histories in Polar Coordinates*; J. Math. Phys. **10**, 1422–1428 (1969)
- [97] A. Pelster: *Untersuchung der Eigenschaften spezieller Ljapunov-Funktionen in der Umgebung von Instabilitäten in Nichtgleichgewichtssystemen*; Diplomarbeit, Universität Stuttgart (1992)
- [98] A. Pelster, A. Wunderlin: *On the Generalization of the Duru-Kleinert-Propagatortransformations*; Z. Phys. B **89**, 373–386 (1992)
- [99] A. Pelster, A. Wunderlin: *Unification of Different Propagator Transformations in Quantum Mechanics*; Proceedings of the Fourth International Conference on Path Integrals from meV to MeV, Tutzing, Bavaria, May 18 – 21, 1992; World Scientific, 335–342 (1993)
- [100] A. Pelster, A. Wunderlin, K. Zeile: *Space and Time Transformations in Classical Mechanics and in Quantum Mechanics*; Rep. Math. Phys. **33**, 163–173 (1993)
- [101] A. Pelster, A. Wunderlin, K. Zeile: *Transformations of Space and Time in Quantum Mechanics in Comparison to Classical Mechanics*; Proceedings of the International Conference on Path Integrals in Physics, Chulalongkorn University, Bangkok, January 7 – 12, 1993; World Scientific, 396–409 (1995)
- [102] A. Pelster, A. Wunderlin, K. Zeile: *Mapping of Discrete Spectral Data in Non-relativistic Quantum Mechanics*; Proceedings of the International Workshop on Quantum Systems – New Trends and Methods, Minsk, Belarus, May 23 – 29, 1994; World Scientific, 321–332 (1995)

- [103] A. Pelster, A. Wunderlin, K. Zeile: *Mapping of Discrete Spectral Data in Non-relativistic Quantum Mechanics*; Proceedings of the *Foundations of Modern Physics 1994 – 70 Years of Matter Waves, Helsinki, Finland, June 13–16, 1994*; Editions Frontiers, 189–199 (1994)
- [104] B. Podolsky: *Quantum-Mechanically Correct Form of Hamiltonian Function for Conservative Systems*; Phys. Rev. **32**, 812–816 (1928)
- [105] H. Poincaré: *Sur le Problème des Trois Corps et les Équations de la Dynamique*; Acta math. **13**, 1–271 (1890)
- [106] T. Regge: *Introduction to Complex Orbital Momenta*; N. Cim. **24**, 951–976 (1959)
- [107] H. Risken: *The Fokker-Planck Equation – Methods of Solution and Applications*; Springer-Verlag, 2. Edition (1988)
- [108] G. Roepstorff: *Path Integral Approach in Quantum Physics – An Introduction*; Springer-Verlag (1994)
- [109] R.M. Rosenberg: *Analytical Dynamics of Discrete Systems*; Plenum Press (1977)
- [110] M. Schanz: *Zur Analytik und Numerik zeitlich verzögerter synergetischer Systeme*; Dissertation, Universität Stuttgart, in Bearbeitung
- [111] J.A. Schouten: *Ricci-Calculus*; Springer-Verlag, 2. Edition (1954)
- [112] E. Schrödinger: *Quantisierung als Eigenwertproblem – Erste Mitteilung*; Ann. d. Phys. **79**, 361–376 (1926)
- [113] E. Schrödinger: *Quantisierung als Eigenwertproblem – Zweite Mitteilung*; Ann. d. Phys. **79**, 489–527 (1926)
- [114] E. Schrödinger: *Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen*; Ann. d. Phys. **79**, 734–756 (1926)
- [115] E. Schrödinger: *Space-Time Structure*; Cambridge University Press (1954)
- [116] L.S. Schulman: *Techniques and Applications of Path Integration*; John Wiley & Sons (1981)
- [117] H.G. Schuster: *Deterministisches Chaos – Eine Einführung*; VCH Verlagsgesellschaft (1994)
- [118] C.L. Siegel: *Vorlesungen über Himmelsmechanik*; Springer-Verlag (1956)
- [119] C. Simmendinger: *Untersuchung von Instabilitäten in nichtlinearen Systemen mit zeitlicher Verzögerung*; Diplomarbeit, Universität Stuttgart (1995)

- [120] W.I. Smirnow: *Lehrgang der Höheren Mathematik, Teil III,2*; VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 4. berichtigte Auflage (1963)
- [121] W.I. Smirnow: *Lehrgang der Höheren Mathematik, Teil IV*; VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 3. berichtigte Auflage (1963)
- [122] A. Sommerfeld: *Partielle Differentialgleichungen der Physik*; Band VI der Reihe *Vorlesungen über Theoretische Physik*, Verlag Harri Deutsch, Nachdruck der 6. Auflage (1992)
- [123] M.R. Spiegel: *Theory and Problems of Complex Variables – With an Introduction to Conformal Mapping and its Applications*; Schaum's Outline Series, McGraw-Hill Company (1964)
- [124] E. Stiefel, G. Scheifele: *Linear and Regular Celestial Mechanics*; Springer-Verlag (1971)
- [125] S.N. Storchak: *Rheonomic Homogeneous Point Transformation and Reparametrization in the Path Integral*; Phys. Lett. **A 135**, 77–85 (1989)
- [126] K.F. Sundman: *Mémoire sur le Problème des Trois Corps*; Acta Math. **36**, 105–179 (1913)
- [127] G.N. Watson: *The Diffraction of Electric Waves by the Earth*; Proc. R. Soc. Lond. **A 95**, 83–99 (1919)
- [128] G.N. Watson: *The Transmission of Electric Waves round the Earth*; Proc. R. Soc. Lond. **A 95**, 546–563 (1919)
- [129] S. Weinberg: *Gravitation and Cosmology – Principles and Applications of the General Theory of Relativity*; John Wiley & Sons (1972)
- [130] U. Weiss: *Quantum Dissipative Systems*; Series in Modern Condensed Matter Physics, Vol. 2, World Scientific (1992)
- [131] E.T. Whittaker: *A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies – With an Introduction to the Problem of Three Bodies*; Cambridge University Press (1959)
- [132] D. Wintgen: *Quantisiertes Chaos*; Phys. Bl. **49**, 641–644 (1993)
- [133] W. Wischert, A. Wunderlin, A. Pelster, M. Olivier, J. Gros Lambert: *Delay-Induced Instabilities in Nonlinear Feedback Systems*; Phys. Rev. **E 49**, 203–219 (1994)
- [134] W. Wischert: *Anwendung synergetischer Konzepte auf Selbstorganisationsprozesse in zeitlich verzögerten Systemen*; Dissertation, Universität Stuttgart,

Shaker-Verlag (1994)

- [135] S. Wittmer: *Supersymmetrische Quantenmechanik und Semiklassische Näherung*; Diplomarbeit, Universität Stuttgart (1992)
- [136] A. Young, C. DeWitt-Morette: *Time Substitution in Stochastic Processes as a Tool in Path Integration*; Ann. Phys. **169**, 140-166 (1994)
- [137] K. Zeile, A. Pelster, A. Wunderlin: *Quantum Energy Mapping – An Interpretation Based on Classical Orbits*; Phys. Lett. **A 179**, 161–166 (1993)
- [138] K. Zeile, A. Pelster, A. Wunderlin: *A New Approach to Schrödinger’s Perturbation Theory by the Application of Nonintegrable Space-Time Transformations*; to be published

# Zitatenverzeichnis

- [1] H. Genz: *Symmetrie – Bauplan der Natur*; Piper-Verlag, durchgesehene Neuauflage (1992), S. 144 15
- [2] I. Newton: *Mathematische Prinzipien der Naturlehre*; Deutsche Ausgabe, Herausgegeben von J.Ph. Wolfers (1872); Nachdruck, Wissenschaftliche Buchgesellschaft (1963), S. 25 17
- [3] H. Weyl: *Symmetrie*; Übersetzt von L. Bechtolsheim, Birkhäuser-Verlag (1955), S. 13 21
- [4] H. Poincaré: *Der Wert der Wissenschaft*; Übersetzt von E. Weber, Teubner-Verlag (1910), S. 33 31
- [5] R.P. Feynman, R.B. Leighton, M. Sands: *Feynman Vorlesungen über Physik, Band I – Hauptsächlich Mechanik, Strahlung und Wärme*; Oldenbourg-Verlag (1987), S. 21 47
- [6] M. Kaku, J. Trainer: *Jenseits von Einstein – Die Suche nach der Theorie des Universums*; Insel-Verlag (1996), S. 64 83
- [7] R.P. Feynman: *Vom Wesen physikalischer Gesetze*; Piper-Verlag; 2. Auflage (1993), S. 74 99
- [8] Brief von W. Heisenberg an W. Pauli am 24. Juni 1925; Zitiert in A. Hermann: *Die Jahrhundertwissenschaft – W. Heisenberg und die Physik seiner Zeit*; Deutsche Verlags-Anstalt (1977), S. 68 121
- [9] R.P. Feynman, R.B. Leighton, M. Sands: *Feynman Vorlesungen über Physik, Band I – Hauptsächlich Mechanik, Strahlung und Wärme*; Oldenbourg-Verlag (1987), S. 19 133
- [10] H. Minkowski: *Raum und Zeit*; Vortrag auf der 80. Versammlung Deutscher Naturforscher und Ärzte zu Köln am 21. September 1908; Nachdruck in H.A. Lorentz, A. Einstein, H. Minkowski: *Das Relativitäts-* 139

- prinzip – Eine Sammlung von Abhandlungen*; Teubner-Verlag, 4. vermehrte Auflage (1922), S. 54
- [11] A. Einstein: *Mein Weltbild*; Herausgegeben von C. Seelig, Ullstein-Verlag (1959), S. 121 153
- [12] S. Weinberg: *Die ersten drei Minuten – Der Ursprung des Universums*; Deutscher Taschenbuch Verlag, 6. Auflage (1986), S. 162 185

# Danksagung

Prof. Dr. Dr. h.c. mult. H. Haken danke ich für die Aufnahme an das Institut für Theoretische Physik und Synergetik sowie für die wohlwollende Unterstützung des Dissertationsvorhabens. Ein besonderer Dank gebührt dem Hauptberichter Prof. Dr. A. Wunderlin, da er die Anfertigung der Dissertation im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 230 (Natürliche Konstruktionen – Leichtbau in Architektur und Natur) ermöglichte. Seine vorbildliche Betreuung trug wesentlich zum Gelingen der vorliegenden Arbeit bei. Den Mitbericht hat dankenswerterweise Prof. Dr. M. Wagner übernommen.

Anregungen zur Dissertation habe ich den nachfolgend aufgeführten Personen zu verdanken. Durch die Vorlesung „Funktionalintegralmethoden und ihre Anwendung auf dissipative Quantensysteme“ von Prof. Dr. U. Weiß [130] im Sommersemester 1991 und durch seine beiden Literaturhinweise [38, 82] bin ich erstmals auf die Problemstellungen gestoßen, die der Dissertation zugrunde liegen. Die lebhaften Diskussionen mit Prof. Dr. H. Kleinert haben stets mein Interesse an Pfadintegralen im allgemeinen und an nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen im besonderen aufrecht erhalten. Sowohl die Einführung der Potentialparameter in Kapitel 4 als auch die Anwendung nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in der Störungstheorie in Kapitel 6 gehen auf Ideen von Dr. K. Zeile zurück [137, 138]. Dr. R. Friedrich hat mich immer wieder auf die Bedeutung des Fredholmschen Alternativsatzes (Abschnitt 6.3) hingewiesen. Die Referenzen zur Diracschen Formulierung der klassischen Mechanik (Anhang A) verdanke ich Dr. M. Schindel. Dr. P. Rehberg hat mich auf die Arbeiten von Poincaré und Sundman zu nichtintegrablen Raum-Zeit-Transformationen in der Himmelsmechanik aufmerksam gemacht (Abschnitt 1.1). Außerdem möchte ich mich noch für einen regen Gedankenaustausch bei Prof. Dr. B. Eckhardt, Dr. C. Grosche, Prof. Dr. A. Inomata, Dr. G. Junker, Prof. Dr. E.



Kröner, Prof. Dr. V.I. Man'ko, Prof. Dr. G. Roepstorff, Prof. Dr. I. Rotter, Prof. Dr. L.S. Schulman, Prof. Dr. F. Steiner und Prof. Dr. L. Streit bedanken.

Prof. Dr. A. Wunderlin und Dr. W. Wischert habe ich zu verdanken, daß ich neben der Anfertigung der vorliegenden Dissertation auch an der Anwendung synergetischer Konzepte auf Selbstorganisationsprozesse in zeitlich verzögerten Systemen mitarbeiten konnte [133, 134]. Außerdem danke ich Michael Schanz und Christian Simmendinger für die erfolgreiche Zusammenarbeit in der Normalformentheorie [110] und in der Floquet-Theorie [119] zeitlich verzögerter Systeme.

Ich danke allen Mitgliedern des Institutes für die angenehme und kollegiale Arbeitsatmosphäre. Insbesondere Dr. R. Haas und Michael Schanz halfen mir freundlicherweise, auftretende Probleme mit der Hard- und Software zu beseitigen.

Ein herzlicher Dank gilt schließlich meinen Eltern, meinen Schwiegereltern und meiner Ehefrau Brigitte, die mich auf meinem bisherigen Weg stets aufmunternd unterstützten.

# Lebenslauf

Axel Pelster:	geboren am 12. Mai 1966 in Backnang
Vater:	Dr. rer. pol. Dipl.-Ing. Klaus Pelster
Mutter:	Erika Pelster, geborene Knopp
1972 - 1976	Grundschule in Backnang
1976 - 1985	Gymnasium in der Taus, Backnang
Mai 1985	Abitur
Okt. 1985 - Sep. 1986	Ableistung des Grundwehrdienstes als Ladeschütze im Leopard 1A4 bei der 2./293 in Stetten am kalten Markt
Okt. 1986	Beginn des Physik-Studiums an der Universität Stuttgart
Feb. 1987	Aufnahme in die Studienstiftung des Deutschen Volkes
Okt. 1988	Vordiplom
Juli 1992	Abschluß des Physik-Studiums an der Universität Stuttgart mit einer Diplomarbeit am Institut für Theoretische Physik und Synergetik von Prof. Dr. Dr. h.c. mult. H. Haken unter der Betreuung des Privatdozenten Dr. A. Wunderlin zum Thema <i>Untersuchung spezieller Eigenschaften von Ljapunov-Funktionen in der Umgebung von kritischen Stellen in Nichtgleichgewichtssystemen</i>
Aug. 1992 - Dez. 1995	Wissenschaftlicher Angestellter im Sonderforschungsbereich 230 <i>Natürliche Konstruktionen – Leichtbau in Architektur und Natur</i> an der Universität Stuttgart
30. Juli 1993	Heirat mit Dipl.-Chem. Brigitte Koch
Jan. 1996 - April 1996	Wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Theoretische Physik und Synergetik von Prof. Dr. Dr. h.c. mult. H. Haken

- Feb. 1996      Abschluß der Promotion in Physik an der Universität Stuttgart mit einer Doktorarbeit am Institut für Theoretische Physik und Synergetik von Prof. Dr. Dr. h.c. mult. H. Haken unter der Betreuung von Prof. Dr. A. Wunderlin zum Thema *Zur Theorie und Anwendung nichtintegrabler Raum-Zeit-Transformationen in der klassischen Mechanik und in der Quantenmechanik*
- seit April 1996      Wissenschaftlicher Mitarbeiter von Prof. Dr. H. Kleinert am Institut für Theoretische Physik der Freien Universität Berlin
23. Juli 1996      Geburt der Tochter Jasmin

*Das Bestreben, das Universum zu verstehen, hebt das  
menschliche Leben ein wenig über eine Farce hinaus  
und verleiht ihm einen Hauch von tragischer Würde.*

S. Weinberg

