

Martin Daumer

Streutheorie aus der Sicht
Bohmscher Mechanik

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	3
1 Quantenmechanik und die Entwicklung der Streutheorie	5
1.1 Notation und mathematisches Rüstzeug	5
1.2 Grundzüge der Quantenmechanik	8
1.3 Zur Geschichte der Streutheorie	10
2 Bohrsche Mechanik	15
3 Streutheorie mit Trajektorien – Physikalische Heuristik	22
4 Streutheorie mit Trajektorien – Mathematische Resultate	30
4.1 Der „Scattering-into-Cones“-Satz	30
4.2 Der „Flux-across-Surfaces“-Satz	32
5 Erweiterungen, Bemerkungen, Folgerungen	46
5.1 Zu langreichweitigen Potentialen	46
5.2 Zur asymptotischen Geschwindigkeit	48
5.3 Zu N -Teilchen-Problemen	49
5.4 Zum asymptotischen Streuquerschnitt und der S -Matrix	49
5.5 Zur Definition von Streuzuständen	54
5.6 Zur Bedeutung von Wellenoperatoren und zur asymptotischen Vollständigkeit	57
5.7 Zur Methode von GREEN und LANFORD	58
5.8 Zur Ableitung des Impulsoperators und der HEISENBERGSchen Unschärfe- relation	59
Zusammenfassung	61

Einleitung

Quantenmechanik ist eine der erfolgreichsten Theorien, die je geschaffen wurden. Nach über 60 Jahren seit ihrer Entstehung wird sie jedoch immer noch von elementaren Problemen überschattet, die trotz großer Anstrengung nicht befriedigend gelöst sind.

Ist ein Elektron ein Teilchen oder eine Welle, weder Teilchen noch Welle, oder sowohl Teilchen als auch Welle? Gibt es eine quantenmechanische „Realität“? Gilt Quantenmechanik auch für makroskopische Körper? Wenn nein, wo ist die Grenze? Wenn ja, ist dann „SCHRÖDINGERS Katze“ gleichzeitig tot und lebendig? Ist der Mond da, wenn keiner hinschaut? Beinhaltet die Wellenfunktion eine vollständige Beschreibung der physikalischen Realität? Kollabiert die Wellenfunktion? Wenn ja, warum, wann und wie oft? Gibt es verborgene Parameter? Warum entstehen schmale Spuren in einer Blaskammer? Wann zerfällt ein radioaktiver Kern? Warum gibt es keinen Zeitoperator – keine Zeit-Observable – obwohl es doch Zeitmessungen gibt?

Diese und ähnliche Fragen werden im Rahmen der BOHMSchen Mechanik beantwortet [13] [6] [29]. BOHMSche Mechanik ist eine Punktteilchenmechanik, die – wie die NEWTONSche Mechanik – ohne intrinsische Bezugnahme auf Beobachter, Meßapparaturen und Observable formuliert ist. Ihre statistische Analyse zeigt aber, daß sie dem Formalismus der Quantenmechanik zugrunde liegt [13] [29]. Wir wollen hier auf die obigen Fragen nicht eingehen, sondern *Streutheorie* aus der Sicht BOHMSchen Mechanik entwickeln.

Die *quantenmechanische* Streutheorie ist ein mathematischer Formalismus, dessen Bezug zu realen, d.h. physikalischen Streusituationen nur recht unklar im Sinne von „Idealisierungen“ gegeben ist. Den Kern der Unklarheit bilden dabei die Fragen, auf welche Theorie sich die Idealisierungen beziehen und von welchen exakten Formeln die quantenmechanischen Formeln Approximationen darstellen.

Wir werden zeigen, daß – und in welchem Sinne – der quantenmechanische Formalismus der Streutheorie in der Tat eine Idealisierung der Beschreibung der Streutheorie der BOHMSchen Mechanik ist.

Nach einer Einführung in die Problematik der Quantenmechanik und in die Geschichte der quantenmechanischen Streutheorie stellen wir in Kapitel 2 BOHMSche Mechanik dar. Zur Vorbereitung auf die Streutheorie diskutieren wir allgemein die statistische Verteilung

lung von Austrittsorten und Austrittszeiten der Teilchentrajektorien aus geschlossenen Oberflächen, die ja innerhalb der Quantenmechanik nicht existiert. In Kapitel 3 wird dann die Streutheorie für BOHMSche Mechanik entwickelt. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung dafür, daß die Trajektorien von Teilchen insbesondere Kugeloberflächen kreuzen, führt auf den „Flux-across-Surfaces“-Satz, den mathematischen und physikalischen Kern der Streutheorie. Nach dem heuristischen Kapitel 3 beweisen wir in Kapitel 4 den „Flux-across-Surfaces“-Satz, zuerst für freie Bewegung und dann für Bewegung mit Wechselwirkung¹. Im Wechselwirkungsfall benutzen wir die Technik der verallgemeinerten Eigenfunktionen. Dazu benötigen wir einige Glattheitseigenschaften der verallgemeinerten Eigenfunktionen, für die wir bisher keine passende Referenz gefunden haben. Es ist klar, daß diese Eigenschaften von vielen Potentialen erfüllt werden – wir nennen sie „asymptotische FOURIER-Potentiale“. Die Voraussetzungen, unter denen wir die Sätze beweisen werden sind viel zu stringent, und es erschien uns daher wenig sinnvoll, die Potentialklasse genauer festzulegen. In Kapitel 5 gehen wir auf mögliche Erweiterungen des „Flux-across-Surfaces“-Satzes für Potentiale mit langer Reichweite ein und diskutieren Streutheorie mit mehreren Teilchen. Dann stellen wir die Beziehung unseres Zugangs mit den sonst üblichen Zugängen her. Es geht dabei um die Fragen nach der Bedeutung des Streuquerschnitts, dem Zusammenhang zwischen der „stationären Streutheorie“ und der „zeitabhängigen Streutheorie“, der Bedeutung von Wellenoperatoren, der *S*-Matrix und dem Konzept der asymptotischen Vollständigkeit. Dabei wird deutlich, daß wir mit dieser Arbeit die quantenmechanische Streutheorie erstmals begründen.

¹Eine heuristische Begründung für die Gültigkeit dieses Satzes wurde in [17] formuliert.

Kapitel 1

Quantenmechanik und die Entwicklung der Streutheorie

1.1 Notation und mathematisches Rüstzeug

In diesem Kapitel werden die wesentlichen mathematisch-physikalischen Grundlagen bereitgestellt, die in dieser Arbeit verwendet werden. Das Material ist überwiegend Standard-Lehrbuchstoff und findet sich etwa in REED-SIMON [64] [65]. Was hier jedoch neu betont wird, ist die Bedeutung von Positiv-Operator-wertigen-Maßen (POVs). Sie sind einerseits eine natürliche Verallgemeinerung von Projektions-Operator-wertigen-Maßen (PVs), andererseits – und für uns bedeutungsvoller – eine Verallgemeinerung des Observablenbegriffs in der Standard-Quantenmechanik (DAVIES [22], LUDWIG [53]).

Für $x \in \mathbb{R}^n$ bezeichnet $|x|$ den Betrag. Im Fall $n = 3$, der häufig auftritt, verwenden wir die „bold-face“-Konvention, d. h. für $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ ist $x := |\mathbf{x}|$ der Betrag. Integrale einer vektorwertigen Funktion \mathbf{j} über eine gerichtete Oberfläche ∂G mit der Flächennormale $\nu : \partial G \rightarrow \mathbb{R}^3$ werden als $\int_{\partial G} \mathbf{j} \cdot \nu d\sigma$ geschrieben. Warnung: $\|f\|_\infty := \sup_{x \in \mathbb{R}^n} |f(x)|$ bezeichnet die Supremumsnorm. Für $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ist die FOURIER-Transformierte \hat{f} definiert über

$$\hat{f}(k) := \text{l.i.m.}_{R \rightarrow \infty} (2\pi)^{-n/2} \int_{|x| < R} dx e^{-ik \cdot x} f(x) \quad (1.1)$$

wobei „l.i.m.“ den Limes in $L^2(\mathbb{R}^n)$ bedeutet. Wir werden allerdings oft kurz schreiben $\hat{f}(k) = (2\pi)^{-n/2} \int dx e^{-ik \cdot x} f(x)$ $\check{f}(x) := (2\pi)^{-n/2} \int dk e^{ik \cdot x} f(k)$ bezeichnet die inverse FOURIER-Transformation und $\mathcal{F} : L^2 \rightarrow L^2$ die unitäre Abbildung $f \mapsto \mathcal{F}f := \hat{f}$.

\mathcal{H} bezeichnet einen komplexen HILBERT-Raum mit Norm $\|\phi\| := \sqrt{(\phi, \phi)}$. Für einen beschränkten linearen Operator A auf \mathcal{H} ist $\|A\|_{op} = \sup_{\|\phi\|=1} \|A\phi\| < \infty$

Ein beschränkter Operator A heißt kompakt, falls $\{A\phi_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ eine Norm-konvergente Teilfolge für jede Norm-beschränkte Folge $\{\phi_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ in \mathcal{H} besitzt. A^\dagger ist der adjungierte

Operator zu A . A heißt selbstadjungiert, falls $A^\dagger = A$, unitär, falls $AA^\dagger = A^\dagger A = 1$, und Orthogonal-Projektion, falls $A^2 = A = A^\dagger$. Das Spektrum $\sigma(A)$ von A ist die Menge komplexer Zahlen z , für die $(A - zI)$ kein beschränktes Inverses besitzt. $\sigma(A)$ ist eine nichtleere, beschränkte Teilmenge der komplexen Ebene \mathbb{C} . Ist A selbstadjungiert, so liegt das Spektrum auf der reellen Achse \mathbb{R} . Ist A kompakt, besteht das Spektrum aus einer Folge von Punkten in der komplexen Ebene, die sich entweder am Ursprung häuft oder endlich ist. Für einen selbstadjungierten Operator A definieren wir $A \geq 0$, falls $\sigma(A) \subseteq [0, \infty)$, oder äquivalent dazu $(A\phi, \phi) \geq 0$ für alle $\phi \in \mathcal{H}$.

Wir unterscheiden verschiedene Arten von Konvergenz. A_n konvergiert in Norm gegen A , falls $\lim_{n \rightarrow \infty} \|A_n - A\|_{op} = 0$. A_n konvergiert im starken Sinn gegen A , falls $\lim_{n \rightarrow \infty} \|A_n\phi - A\phi\| = 0$ für alle $\phi \in \mathcal{H}$, und wir schreiben in diesem Fall $s\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} A_n = A$. A_n konvergiert im schwachen Sinn gegen A , falls $\lim_{n \rightarrow \infty} (A_n\phi, \psi) = (A\phi, \psi)$ für alle $\phi, \psi \in \mathcal{H}$. Eine norm-konvergente Folge ist stark konvergent, und eine stark konvergente Folge ist schwach konvergent.

Ein unbeschränkter Operator A auf einem HILBERT-Raum \mathcal{H} ist eine lineare Abbildung $A : \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{H}$, wobei der Definitionsbereich $\mathcal{D} = \text{dom}(A)$ einen dichten linearen Unterraum von \mathcal{H} bezeichnet.

Jeder selbstadjungierte Operator A erzeugt eine stark stetige einparametrische unitäre Gruppe $U(t)$ über $U(t) := e^{itA}$. Umgekehrt, für jede einparametrische unitäre Gruppe $U(t)$ gibt es einen selbstadjungierten Operator A , so daß $U(t) = e^{itA}$.

Sei A selbstadjungiert und $P_\Delta^A := \chi_\Delta(A)$, wobei χ_Δ die charakteristische Funktion der BOREL-Menge $\Delta \in \mathcal{B}(\Omega)$, $\Omega = \mathbb{R}$ bezeichnet. Die Familie $\{P_\Delta\}_{\Delta \in \mathcal{B}(\Omega)}$ ist ein Projektionsoperator-wertiges-Maß (PV), d.h.

1. Für jedes meßbare $\Delta \subset \Omega : P_\Delta = P_\Delta^2 = P_\Delta^\dagger$.
2. $P_\Omega = I, P_\emptyset = 0$.
3. Falls $\Delta = \bigcup_{n=1}^\infty \Delta_n$ mit $\Delta_n \cap \Delta_m = \emptyset$ für $n \neq m$, dann ist $P_\Delta = s\text{-}\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N P_{\Delta_n}$.
4. $P_{\Delta_1} P_{\Delta_2} = P_{\Delta_1 \cap \Delta_2}$.

Man beachte, daß (4) aus (1) und (3) folgt (siehe auch [64], S. 235).

Der Spektralsatz beinhaltet eine ein-eindeutige Entsprechung von selbstadjungierten Operatoren A und PVs $\{P_\Delta\}_{\Delta \in \mathcal{B}(\Omega)}$ auf \mathcal{H} , $A = \int_{-\infty}^\infty \lambda dP_\lambda$. Falls $g(\cdot)$ eine reellwertige BOREL-Funktion auf \mathbb{R} ist, dann ist $g(A) = \int_{-\infty}^\infty g(\lambda) P(d\lambda)$ definiert auf $D_g = \{\phi \mid \int_{-\infty}^\infty |g(\lambda)|^2 d(\phi, P_\lambda \phi) < \infty\}$ selbstadjungiert.

Jedes $\psi \in \mathcal{H}$ erzeugt über ein PV $\{P_\Delta\}_{\Delta \in \mathcal{B}(\Omega)}$, bzw. über den dazu assoziierten selbstadjungierten Operator A ein nichtnegatives abzählbar additives BOREL-Maß μ_A^ψ , oder kurz μ^ψ mit $\mu^\psi(\Delta) := (\psi, P_\Delta \psi)$ für jedes meßbare Δ , nämlich das Spektralmaß.

Nach dem Zerlegungssatz von LEBESGUE hat $\mu^\psi(\Delta)$ die eindeutige Zerlegung in $\mu^\psi = \mu_{ac}^\psi + \mu_s^\psi$, wobei μ_{ac}^ψ absolut stetig und μ_s^ψ singulär bezüglich des LEBESGUE-Maßes auf \mathbb{R} ist. Für einen selbstadjungierten Operator A wird die Menge der Vektoren in \mathcal{H} mit absolut-stetigem (singulärem) Spektralmaß als $\mathcal{H}_{ac}(A)$ bzw. $\mathcal{H}_s(A)$ bezeichnet, oder einfach als $\mathcal{H}_{ac}, \mathcal{H}_s$. \mathcal{H}_s zerfällt in $\mathcal{H}_s = \mathcal{H}_{sc} \oplus \mathcal{H}_{pp}$, den singulärstetigen Teilraum und den (nicht notwendig abgeschlossenen) Teilraum der Eigenvektoren von A . \mathcal{H}_{ac} und \mathcal{H}_s sind abgeschlossene Unterräume von \mathcal{H} , paarweise orthogonal, und es gilt $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{ac} \oplus \mathcal{H}_s = \mathcal{H}_{ac} \oplus \mathcal{H}_{sc} \oplus \mathcal{H}_{pp}$.

Ein Positiv-Operator-wertiges-Maß (POV) $\{Z_\Delta\}_{\Delta \in \mathcal{B}(\Omega)}$ ist nun eine Familie linearer Operatoren, so daß

1. Für jedes meßbare $\Delta \subset \Omega$: $Z_\Delta = Z_\Delta^\dagger \geq 0$
2. $Z_\Omega = I, Z_\emptyset = 0$.
3. Falls $\Delta = \bigcup_{n=1}^\infty \Delta_n$ mit $\Delta_n \cap \Delta_m = \emptyset$ für $n \neq m$, dann ist $Z_\Delta = s\text{-}\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N Z_{\Delta_n}$.

Man beachte, daß die Operatoren Z_Δ im allgemeinen keine Orthogonal-Projektionen sind, und daß daher eine Entsprechung von (4) bei PVs im allgemeinen für POVs nicht gilt. Natürlich ist jedes PV ein POV.

Im allgemeinen gibt es, im Gegensatz zu PVs, keine ein-eindeutige Zuordnung von POVs zu selbstadjungierten Operatoren. $A := \int \lambda dZ_\lambda$ ist selbstadjungiert, aber A bestimmt kein eindeutiges POV (man denke an den Spektralsatz).

Die Bedeutung der POVs – und damit auch der PVs – für die Physik begründet sich aus folgendem: Ein POV ist die allgemeinste bilineare Abbildung von \mathcal{H} auf Wahrscheinlichkeitsmaße, indem man für jedes $\Delta \in \mathcal{B}(\Omega)$ $\mu^\psi(\Delta) := (\psi, Z_\Delta \psi)$ setzt (darum die Normierungsbedingung $Z_\Omega = I$). Falls betont werden soll, daß das Maß μ^ψ von einem mit dem selbstadjungierten Operator A assoziierten PV erzeugt ist, schreiben wir μ_A^ψ .

Die freie Entwicklung

$H_0 := -\frac{1}{2}\Delta$, wobei Δ den n -dimensionalen LAPLACE-Operator bezeichnet, mit Definitionsbereich $\mathcal{D} = \{\phi \in L^2(\mathbb{R}^n) \mid \int dk k^2 |\hat{\phi}(k)|^2 < \infty\}$ heißt freier HAMILTON-Operator. H_0 ist selbstadjungiert und wesentlich selbstadjungiert auf $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Es gilt

$$\begin{aligned} (e^{-iH_0 t} \psi)(x) &= (2\pi i t)^{-n/2} \int dy e^{i \frac{|x-y|^2}{2t}} \psi(y) \\ &= (2\pi)^{-n/2} \int dk e^{-i \frac{k^2 t}{2}} e^{ik \cdot x} \hat{\psi}(k), \end{aligned} \quad (1.2)$$

wobei $P_0(x, y, t) := (2\pi i t)^{-n/2} e^{i \frac{|x-y|^2}{2t}}$ der freie Propagator heißt.

Für $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ gilt die asymptotische Formel (DOLLARDS Lemma)

$$e^{-iH_0 t} \psi(x) \rightarrow (it)^{-n/2} e^{i\frac{x^2}{2t}} \hat{\psi}(x/t) \quad (1.3)$$

im Sinne der Konvergenz in $L^2(\mathbb{R}^n)$ für $t \rightarrow \pm\infty$. Der sehr einfache Beweis findet sich in REED-SIMON Satz IX 31 [65].

Für $n = 3, \kappa \in \mathbb{C}, \operatorname{Re} \kappa > 0$ ist die Resolvente von H_0 gegeben durch

$$(H_0 + \kappa^2)^{-1} \phi(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-1} \int d^3 y \frac{e^{-\kappa|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \phi(\mathbf{y}). \quad (1.4)$$

Die Funktion $G_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \kappa) := (2\pi)^{-1} \frac{e^{-\kappa|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}$ heißt freie GREENSche Funktion.

1.2 Grundzüge der Quantenmechanik

Im Rahmen der nichtrelativistischen Quantenmechanik ist der Zustand eines N -Teilchen-Systems mit Massen m_1, \dots, m_N durch einen Strahl $c\psi, c \in \mathbb{C}$ im komplexen HILBERT-Raum $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^{3N})$ gegeben. Die Dynamik wird bestimmt durch den selbstadjungierten HAMILTON-Operator $H = H_0 + V$.

Im SCHRÖDINGER-Bild ergibt sich der zeitentwickelte Zustand ψ_t durch die unitäre Transformation $\psi_t := e^{-iHt}\psi$. Die (zeitunabhängigen) „Observablen“ (meßbaren Größen) werden mit selbstadjungierten Operatoren auf \mathcal{H} identifiziert.

Bei einer Messung der Observablen $A = \sum_{i \in \mathbb{N}} \lambda_i P_i$ mit nichtentarteten reellen Eigenwerten $\lambda_i \in \mathbb{R}$ und eindimensionalen Projektoren P_i findet ein Beobachter an einem System im Zustand ψ_t zur Zeit t mit der Wahrscheinlichkeit $\mathbb{P}^A(\lambda_i) := (\psi_t, P_i \psi_t)$ das Meßresultat λ_i , wobei $\|\psi\| = 1$ zu wählen ist. Diese Wahrscheinlichkeit ist damit durch das Spektralmaß des Operators A gegeben, das in diesem Fall ein Punktmaß ist, denn $(\psi_t, P_i \psi_t) = \mu_A^{\psi_t}(\lambda_i)$.

Üblicherweise wird verlangt, daß nach einer (idealen) Messung des nichtentarteten Eigenwerts λ_i das System im Zustand $P_i \psi / \|P_i \psi\|$ ist, und damit bei einer Messung die unitäre Zeitentwicklung unterbrochen ist. Diese „Kollapsregel“ ist ein Ansatzpunkt für die Debatte um die Quantentheorie (siehe etwa PENROSE [61] S. 225ff und BELL [6]). Man beachte auch, daß die Phrase „Messung der Observablen A “ ziemlich sinnlos ist (siehe BELL [7]). Wir verwenden dennoch in diesem Kapitel den üblichen quantenmechanischen Jargon.

Bei einer Messung einer beliebigen Observablen $A = \int \lambda dP_\lambda$, findet ein Beobachter an einem System im Zustand ψ_t zur Zeit t mit der Wahrscheinlichkeit $\mathbb{P}^A(\Delta) := (\psi_t, P_\Delta^A \psi_t) = \mu_A^\psi(\Delta)$ ein Meßresultat in der Menge $\Delta \subset \sigma(A)$.

Der Erwartungswert der Meßwerte bei einer Messung der Observablen A an einem System im Zustand ψ_t zur Zeit t ist $\mathbb{E}(A) := \int \lambda d\mu_A^{\psi_t}(\lambda) = (\psi_t, A\psi_t)$, und die Varianz ist durch $(\Delta A)^2 := \mathbb{E}(A^2) - (\mathbb{E}(A))^2$ gegeben.

Im HEISENBERG-Bild sind im Gegensatz zum SCHRÖDINGER-Bild die Observablen zeitabhängig, während sich der Zustand nicht verändert. Die Observablen entwickeln sich gemäß $A(t) := e^{iHt} A e^{-iHt}$ und erfüllen die „Bewegungsgleichung“ $\frac{d}{dt} A(t) = \frac{i}{\hbar} [H, A] + \frac{\partial}{\partial t} A(t)$. Die Wahrscheinlichkeit, bei der Messung des Operators A zur Zeit t ein Resultat in $\Delta \subset \sigma(A)$ an einem System im (zeitunabhängigen) Zustand ψ zu finden, ist $\mathbb{P}^A(\Delta) := (\psi, P_\Delta^{A(t)} \psi) = \mu_{A(t)}^\psi(\Delta)$.

Aufgrund der Unitarität von e^{-iHt} ist $(\psi, P_\Delta^{A(t)} \psi) = (\psi_t, P_\Delta^A \psi_t)$, und die beiden Bilder ergeben dieselben Vorhersagen für die statistische Verteilung von Meßergebnissen. Man nennt sie „unitär äquivalent“.

Der Ortsoperator ist durch $(\hat{q}\psi)(q) := q\psi(q)$ und der Impulsoperator ist durch $\hat{p}\psi(p) := p\psi(p)$ gegeben (mit $\hat{\psi} := \mathcal{F}\psi$). Es gilt die „kanonische Vertauschungsrelation“ $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ und die HEISENBERGSche Unschärferelation $\Delta\hat{q}\Delta\hat{p} \geq \frac{\hbar}{2}$.

Es gibt Verallgemeinerungen des Begriffs der quantenmechanischen Observablen, indem auch POVs zur Beschreibung der Statistik von Messungen zugelassen werden [22] [53].

In [20] wird gezeigt, daß die Statistik quantenmechanischer Experimente typischerweise durch POVs gegeben werden und nur in Spezialfällen durch PVs und damit durch selbstadjungierte Operatoren. Das folgende Beispiel soll die unterschiedliche Bedeutung von POVs und PVs verdeutlichen.

Beispiel 1.1 Auf \mathcal{H} seien paarweise orthogonale Projektoren P_{-1}, P_0, P_1 mit $\sum_{i=-1}^1 P_i = I$ gegeben. Definiere die positiven Operatoren $Z_1 := P_1 + \frac{1}{2}P_0$, $Z_{-1} := P_{-1} + \frac{1}{2}P_0$. Dann ist durch $Z_\emptyset := 0$, $Z_{i \cup j} := Z_i + Z_j$ für $i \neq j$ ein POV $\{I, Z_{-1}, Z_{-1 \cup 1}, Z_1, Z_\emptyset\}$ auf \mathcal{H} definiert.

Angenommen, die Statistik eines quantenmechanischen Experiments sei durch dieses POV gegeben: Sei $\{X^\psi\}_{\psi \in \mathcal{H}}$ eine Familie von Zufallsvariablen mit Werten in $\Omega = \{-1, 1\}$, die jeweils die möglichen Versuchsausgänge repräsentieren. Für alle $\psi \in \mathcal{H}$ und Teilmengen $\Delta \subset \Omega$ sei die Verteilung der Versuchsausgänge durch

$$\mathbb{P}(X^\psi \in \Delta) = (\psi, Z_\Delta \psi) \quad (1.5)$$

gegeben. Der Erwartungswert der Meßwerte ist damit

$$\mathbb{E}(X^\psi) = (\psi, (Z_1 - Z_{-1})\psi) = (\psi, (P_1 - P_{-1})\psi) \quad (1.6)$$

Dies mag die Einführung der Observablen $A := P_1 - P_{-1}$ nahelegen (des „Mittelwertoperators“). Aber für die Varianz der Meßwerte ergibt sich

$$\mathbb{E}((X^\psi)^2) - (\mathbb{E}(X^\psi))^2 = (\psi, (Z_1 + Z_{-1})\psi) - (\mathbb{E}(X^\psi))^2 = 1 - (\mathbb{E}(X^\psi))^2, \quad (1.7)$$

und diese ist nicht gleich der üblichen quantenmechanischen Varianz der Observablen A

$$(\psi, A^2\psi) - (\psi, A\psi)^2 = (\psi, (P_1 + P_{-1})\psi) - (\mathbb{E}(X^\psi))^2 = 1 - (\mathbb{E}(X^\psi))^2 - (\psi, P_0\psi) \quad (1.8)$$

Bemerkung 1.2 Versucht man also, die Statistik von Meßwerten immer mit einem selbstadjungierten Operator (einer Observablen) zu beschreiben, wird man im allgemeinen zu falschen statistischen Vorhersagen kommen (siehe Bem 2.8).

In der DIRAC-Notation, dem „Bracket“ Formalismus, werden die Spektralprojektoren eines selbstadjungierten Operators A symbolisch geschrieben als $|\lambda\rangle\langle\lambda|d\lambda := P^A(d\lambda)$. Das Skalarprodukt zwischen ϕ und ψ in \mathcal{H} wird mit $\langle\phi|\psi\rangle$ bezeichnet, und $\langle\phi|A|\psi\rangle := (\phi, A\psi)$, also $\langle\phi|A|\psi\rangle = \int \lambda\langle\phi|\lambda\rangle\langle\lambda|\psi\rangle d\lambda$.

Der Nutzen der DIRAC-Notation besteht darin, daß sie formal auch auf Elemente angewendet werden kann, die nicht in \mathcal{H} liegen. Man definiert $\langle q|\psi\rangle := \psi(q)$ und $\langle p|\psi\rangle := \hat{\psi}(p)$. Setzt man $\langle p|q\rangle := (2\pi)^{-n/2}e^{ipq}$, erhält man die üblichen Regeln der FOURIER-Transformation durch $\int dp|p\rangle\langle p| = I$, $\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$. Eindimensionale Projektoren auf Vektoren $\psi \in \mathcal{H}$ werden durch $|\psi\rangle\langle\psi|$ dargestellt. Der Multiplikationsoperator $(\hat{q}\psi)(q) := q\psi(q)$ für $\psi \in \mathcal{D}(\hat{q})$ wird als $\hat{q} = \int dq q|q\rangle\langle q|$ geschrieben, und $f(\hat{q}) = \int f(q)|q\rangle\langle q|$. Der Multiplikationsoperator \hat{p} im FOURIER-Raum, schreibt sich einfach $\hat{p} = \int dp p|p\rangle\langle p|$. Projektionen auf Gebiete $G \subset \mathbb{R}^3$ im Ortsraum werden kurz als $P_G := \chi_G(\hat{q})$ geschrieben. Wir werden die DIRAC-Notation in der heuristischen Argumentation verwenden.

1.3 Zur Geschichte der Streutheorie

Sie beginnt mit:

Ich möchte versuchen, hier eine Interpretation [der Wellenfunktion] zu geben. Dabei knüpfe ich an eine Bemerkung EINSTEINS über das Verhältnis von Wellenfeld und Lichtquanten an; er sagte etwa, daß Wellen nur dazu da seien, um den korpuskularen Lichtquanten den Weg zu weisen, und er sprach in diesem Sinne von einem ‘Gespensterfeld’. Dieses bestimmt die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Lichtquant ... einen bestimmten Weg einschlägt,

Und hier [in der Quantenmechanik] liegt es nahe, die DE-BROGLIE-SCHRÖDINGERSchen Wellen als das ‘Gespensterfeld’ oder besser ‘Führungsfeld’ anzusehen. Ich möchte also versuchsweise die Vorstellung verfolgen: Das Führungsfeld, dargestellt durch eine skalare Funktion ψ der Koordinaten aller beteiligten Partikeln und der Zeit, breitet sich nach der Schrödingerschen Differentialgleichung aus ... Im übrigen wird für das Einschlagen einer bestimmten Bahn nur eine Wahrscheinlichkeit durch die Werteverteilung der Funktion ψ bestimmt. Man könnte das, etwas paradox, etwa so zusammenfassen: Die Bewegung der Partikel folgt Wahrscheinlichkeitsgesetzen, die Wahrscheinlichkeit selbst aber breitet sich im Einklang mit dem Kausalgesetz aus.

M. BORN 1926 [15]

und (aus der Nachfolgearbeit)

Schlußbemerkungen Auf Grund der vorstehenden Überlegungen möchte ich der Meinung Ausdruck geben, daß die Quantenmechanik nicht nur das Problem der stationären Zustände, sondern auch der Übergangsvorgänge zu formulieren und zu lösen erlaubt Die SCHRÖDINGERSche Fassung scheint dabei der Sachlage bei weitem am leichtesten gerecht zu werden, überdies ermöglicht sie die Beibehaltung der gewöhnlichen Vorstellungen von Raum und Zeit, in denen sich die Ereignisse in ganz normaler Weise abspielen Dagegen entspricht die vorgeschlagene Theorie nicht der Forderung der kausalen Bestimmtheit des Einzelereignisses Ich habe in meiner vorläufigen Mitteilung diesen Indeterminismus ganz besonders betont, da er mir mit der Praxis des Experimentators in bester Übereinstimmung zu sein scheint Aber es ist natürlich jedem, der sich damit nicht beruhigen will, unverwehrt, anzunehmen, daß es weitere, noch nicht in die Theorie eingeführte Parameter gibt, die das Einzelereignis determinieren In der klassischen Mechanik sind dies die 'Phasen' der Bewegung, z B die Koordinaten der Teilchen in einem bestimmten Augenblick Es schien mir zunächst unwahrscheinlich, daß man Größen, die diesen Phasen entsprechen, zwanglos in die neue Theorie einfügen könne, aber Herr FRENKEL hat mir mitgeteilt, daß dies vielleicht doch geht Wie dem auch sei, diese Möglichkeit würde nichts an dem praktischen Indeterminismus der Stoßvorgänge ändern, da man ja die Werte der Phasen nicht angeben kann, sie muß übrigens zu denselben Formeln führen, wie die hier vorgeschlagene 'phasenlose' Theorie

M BORN 1926 [16]

Die Matrizenmechanik von HEISENBERG [41] und die Wellenmechanik von SCHRÖDINGER [68] stellten zwei konkurrierende Ansätze in den Anfängen der modernen Quantenmechanik dar, die für eine umfassende Theorie in Frage kamen.

HEISENBERG [41] berechnete die Eigenwerte unendlich-dimensionaler Matrizen, die über das „Korrespondenzprinzip“ und über die „Quantisierung“ aus den entsprechenden Gleichungen der klassischen Mechanik postuliert werden Damit konnte zum Beispiel das Spektrum eines harmonischen Oszillators berechnet werden.

SCHRÖDINGER [68] betrachtete dagegen „stationäre“ Lösungen der nach ihm benannten Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t(\mathbf{x}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right) \psi_t(\mathbf{x}). \quad (1.9)$$

Stationäre Lösungen haben die Form $\psi_t(\mathbf{x}) = e^{-iEt} \psi(\mathbf{x})$ ($|\psi_t(\mathbf{x})|$ ist damit zeitunabhängig). Setzt man diesen Ansatz in die SCHRÖDINGER-Gleichung ein, ergibt sich die stationäre SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) - E \right) \psi(\mathbf{x}) = 0. \quad (1.10)$$

Damit konnten zum Beispiel die Energieniveaus des Wasserstoffatoms berechnet werden.

Eine Beschreibung von zeitabhängigen Vorgängen, wie etwa eines Streuprozesses, wurde von MAX BORN (in den oben zitierten Arbeiten) durchgeführt: Er berechnete Streuprozesse im Rahmen der SCHRÖDINGERSchen Wellenmechanik, indem er $|\psi_t(\mathbf{x})|^2$ als die

Wahrscheinlichkeitsdichte dafür nahm, daß sich ein Teilchen zur Zeit t bei \mathbf{x} befindet, wobei sich die Teilchen entlang Bahnen – irgendwie durch ψ bestimmt – bewegen. Dies ist der Inhalt der „BORNschen statistischen Deutung“ der Wellenfunktion. Damit sie konsistent ist, muß die Kontinuitätsgleichung

$$\nabla \mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) + \frac{d}{dt} |\psi_t(\mathbf{x})|^2 = 0 \quad (1.11)$$

gelten, wobei

$$\mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) := \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \psi_t^*(\mathbf{x}) \nabla \psi_t(\mathbf{x}) \quad (1.12)$$

den „Quantenfluß“ darstellt. Er wird als Teilchenstromdichte interpretiert, die damit die Wahrscheinlichkeitsverteilung von Teilchenbahnkreuzungen pro Zeit- und Flächeneinheit bestimmt.

Der grundlegende Ansatz der „naiven Streutheorie“ ([66], S. 355f) bestand darin, Lösungen der stationären SCHRÖDINGER-Gleichung 1.10, die ja für die Berechnung der negativen Eigenenergien gute Dienste geleistet hatte, für positive Energien $E = k^2$ zu finden, die sich (in Einheiten $\hbar = 1$ und $m = 1$) für $x \rightarrow \infty$ und \mathbf{x} in Polarkoordinaten (x, θ, ϕ) und $\mathbf{k} = (0, 0, k)$ wie

$$\psi(\mathbf{x}) \approx e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikx}}{x} \quad (1.13)$$

verhalten, also insbesondere nicht quadratintegrabel sind. Der Term $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$ wird dabei als der einfallende Strahl mit Wellenvektor \mathbf{k} interpretiert. Der Term $\frac{e^{ikx}}{x}$ repräsentiert die ausfallende Streuwelle mit winkelabhängiger Amplitude $f(\theta, \phi)$. Der Fluß des einlaufenden Strahls $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$ ist damit \mathbf{k} , und der Fluß der auslaufenden Streuwelle ist $\frac{\mathbf{x}}{x^3} k |f(\theta, \phi)|^2$. Die Anzahl von Teilchen, die eine Teilfläche $x^2 d\Omega$ in Richtung (θ, ϕ) einer Kugeloberfläche im Abstand x durchkreuzen, dividiert durch die Anzahl einlaufender Teilchen pro Zeiteinheit und Flächeneinheit, wird als differentieller Wirkungsquerschnitt $d\sigma/d\Omega$ bezeichnet. Also ist

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2, \quad (1.14)$$

und diese Größe sollte sich mittels Detektoren in hinreichend großer Entfernung messen lassen.

Um der heuristischen Argumentation Substanz zu geben, fehlen offenbar die Bahnen der Teilchen, die den Fluß \mathbf{j}^{ψ_t} durch Oberflächen erzeugen. Die Frage nach dem Zusammenhang der Wellenfunktion mit der Bewegung der Teilchen war schon vor Entwicklung der Streutheorie gestellt worden. Bereits vor BORN versuchte L. DE BROGLIE [11] [12] ψ als eine Führungswelle für Punktteilchen aufzufassen, ähnlich der Idee EINSTEINS (siehe das BORN-Zitat), Photonen als punktförmige Objekte aufzufassen, die von einem „Gespensterfeld“ geleitet werden. DE BROGLIE gab diese Idee aber nach scharfer Kritik

einiger namhafter Physiker wieder auf SCHRÖDINGERS ursprüngliche Idee [68] [30] bestand darin, eine reine Wellentheorie zu entwickeln, in der die „Teilchen“ durch schmale Wellenpakete zu ersetzen sind. Dieses Programm scheiterte an der unvermeidbaren Verbreiterung solcher Wellenpakete selbst unter freier Bewegung. Man sieht sofort, daß ein GAUSSSches Wellenpaket $\psi_0(\mathbf{x}) = (2\pi\sigma_0^2)^{-3/4} e^{-x^2/4\sigma_0^2}$ sich gemäß

$$\psi_t(\mathbf{x}) = (e^{-iH_0 t} \psi_0)(\mathbf{x}) = (2\pi s_t^2)^{-3/4} e^{-x^2/4s_t\sigma_0}, \quad s_t = \sigma_0 \left(1 + \frac{t}{2\sigma_0^2}\right) \quad (1.15)$$

entwickelt, so daß die Breite der Verteilung $\rho_t(\mathbf{x}) = |\psi_t(\mathbf{x})|^2$ wie $|s_t|^3 = O(t^3)$ wächst!

Die Existenz von Punktteilchen neben der Wellenfunktion scheint tatsächlich – aufgrund der berühmten HEISENBERGSchen Unschärferelation – gar nicht möglich zu sein. Aus der Ungleichung $\Delta\hat{p}\Delta\hat{q} \geq \frac{\hbar}{2}$ (die für alle Wellenfunktionen gilt) wird oft geschlossen, daß Ort und Geschwindigkeit eines Teilchens nicht gleichzeitig scharf meßbar seien. Da nun nach HEISENBERG nur meßbare Größen in eine physikalische Theorie eingehen sollten, dürfe nicht mehr von der Bahn eines Teilchens gesprochen werden, denn Kenntnis einer Bahn beinhaltet gleichzeitige Kenntnis von Ort und Geschwindigkeit. Als konkretes Beispiel zitieren wir HEISENBERG [43] zur Bewegung eines Elektrons im 1S - Grundzustand des Wasserstoffatoms:

Um die 1S-'Bahn' zu messen, müßte nämlich das Atom mit Licht beleuchtet werden, dessen Wellenlänge jedenfalls kürzer als 10^{-8} cm ist. Von solchem Licht aber genügt ein einziges Lichtquant, um das Elektron völlig aus seiner 'Bahn' zu werfen (weshalb von einer solchen Bahn immer nur ein einziger Raumpunkt definiert werden kann), das Wort 'Bahn' hat also hier keinen vernünftigen Sinn

W HEISENBERG

Es etablierte sich aufgrund dieser Überlegungen die Sichtweise, daß ganz allgemein die meßbaren Größen („Observablen“) die selbstadjungierten Operatoren sind, und der Zustand eines quantenmechanischen Systems *vollständig* durch Angabe der Wellenfunktion gekennzeichnet ist, daß also insbesondere eine Teilchen-Theorie (oder allgemeiner: eine Theorie mit „verborgenen Parametern“) im Sinne des Zitats von BORN unmöglich sei.

Die philosophischen Argumente von BOHR und HEISENBERG zur Vollständigkeit der Quantenmechanik wurden durch mathematische Sätze unterstützt, die ganz allgemein die Existenz von „verborgenen Parametern“ zur Erklärung des quantenmechanischen Zufalls ausschlossen (J. VON NEUMANN [57] und die in BELL [6] diskutierten Arbeiten von GLEASON, KOCHEN und SPECKER).

Umso erstaunlicher ist es, daß es D. BOHM [13] 1952 gelang, eine Punktteilchenmechanik aufzustellen, die mit den statistischen Vorhersagen der Quantenmechanik im Einklang stand. In diesem Zusammenhang sind die Arbeiten von J.S. BELL [6] von Bedeutung,

der unter dem Motto „In 1952 I saw the impossible done“ die „no hidden variables“-Sätze auf ihre unphysikalischen Voraussetzungen hin untersuchte¹. (Soziologische und wissenschaftspolitischen Gründe, weshalb BOHMSche Mechanik für über 40 Jahre von der Mehrheit der Physiker ignoriert wurde, finden sich in „What does a proof do if it does not prove?“ von T. PINCH [63] S. 171, und auch in dem kürzlich erschienenen Artikel von D. ALBERT [1] sowie in GOLDSTEIN und LEBOWITZ [39] KUHN [50] und besonders FEYERABEND [33] verwenden BOHMSche Mechanik als Beispiel, um auf die allgemeine Struktur hinzuweisen, daß die Akzeptanz wissenschaftlicher Theorien weniger von rationalen Argumenten und Experimenten, als von vorherrschenden Dogmen und Schulen abhängt)

Was wir mit BOHMScher Mechanik bewerkstelligen können und um was es uns geht, machen folgende Zitate deutlich:

FEYERABEND schreibt in „Wider den Methodenzwang“ zum Problem der Verknüpfung mathematischer Strukturen am Beispiel des von VON NEUMANN axiomatisch angelegten Operator-Formalismus der Quantenmechanik:

Die theoretischen Beziehungen zwischen diesen Begriffen [Operatoren] lassen sich strenger behandeln als die zwischen den früheren Begriffen (‘strenger’ nach den Vorstellungen von Neumanns und seiner Anhänger). Anders verhält es sich mit ihren Beziehungen zu experimentellen Verfahren Für die große Mehrzahl der beobachtbaren Größen lassen sich keine Meßinstrumente angeben , und wo es möglich ist, muß man bekannte und unwiderlegte Gesetze willkürlich abändern oder aber zugeben, daß einige ganz gewöhnliche Probleme der Quantenmechanik wie das Streuproblem keine Lösung haben (COOK [18]). So wird die Theorie zu einem wahren Monstrum an Strenge und Genauigkeit, während ihre Beziehung zur Erfahrung undeutlicher ist denn je.

aus „Wider den Methodenzwang“, P FEYERABEND [33] S. 83

. . Typically, mathematics knows better what to do than why to do it. Probability theory is a famous example An example which is perhaps of far greater significance is the quantum theory The mathematical structure of operators in HILBERTI space and unitary transformations is clear enough, as are certain features of the interpretation of the mathematics to give physical assertions, particularly assertions about general scattering experiments. But the larger question here, a systematic elaboration of the world-picture which quantum theory provides, is still unanswered Philosophical questions of the deepest significance may well be involved Here also, the mathematical formalism may be hiding as much as it reveals

aus „The pernicious influence of mathematics on science“, J. SCHWARTZ, in [69] S 25

Das Gesetz für die Teilchenbahnen erlaubt eine präzise Beschreibung von Streuvorgängen, vor allem in solchen Details, in denen der Quanten-Formalismus zu vage ist, um sie zu erfassen. Der Status der üblichen quantenmechanischen Streutheorie wird dabei deutlich werden.

¹BELL, und später in ähnlicher Weise auch MERMIN. „You may quote me on that: The proof of VON NEUMANN is not merely false but *foolish* “ (Interview in *Omni*, Mai 1988, S. 88, zitiert in [54])

Kapitel 2

Bohmsche Mechanik

BOHMSche Mechanik ist eine nicht-NEWTONSche Theorie der Bewegung von Punktteilchen, die GALILEI-invariant und zeitumkehrinvariant ist [13] [29] [1]. Der Zustand eines N -Teilchen Systems ist durch die Konfiguration $Q = (\mathbf{Q}_1, \dots, \mathbf{Q}_N) \in \mathbb{R}^{3N}$ und die Wellenfunktion $\psi : \mathbb{R}^{3N} \rightarrow \mathbb{C}$ gegeben. Auf der Teilmenge von \mathbb{R}^{3N} , für die $\psi \neq 0$ und differenzierbar ist, erzeugt ψ ein Geschwindigkeitsfeld $v^\psi = (v_1^\psi, \dots, v_N^\psi)$ mit

$$v_k^\psi(q) = \frac{\hbar}{m_k} \operatorname{Im} \frac{\nabla_k \psi(q)}{\psi(q)} = \frac{\hbar}{2im_k} \frac{\psi^* \nabla_k \psi - \psi \nabla_k \psi^*}{\psi^* \psi}, \quad (2.1)$$

das die Bewegung der Teilchen mit Massen m_1, \dots, m_N bestimmt. Die zeitliche Entwicklung des Zustands (Q_t, ψ_t) ist durch eine Differentialgleichung erster Ordnung für Q_t

$$\frac{dQ_t}{dt} = v^{\psi_t}(Q_t) \quad (2.2)$$

und durch die SCHRÖDINGER-Gleichung für die Wellenfunktion ψ

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_t(q) = \left(- \sum_{k=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_k} \Delta_k + V(q) \right) \psi_t(q). \quad (2.3)$$

gegeben.

A priori ist ψ zunächst nur die Wellenfunktion des Gesamtsystems – eigentlich nur die Wellenfunktion des größten möglichen Systems: des Universums. Da die Geschwindigkeit jedes Teilchens von dem Ort *aller* anderen Teilchen abhängt, ist es von vorneherein unklar, ob und wie Untersysteme – die ja allein relevant sind – dynamisch unabhängig beschrieben werden können. Die Analyse dieses Problems sowie die Ableitung der BORNschen statistischen Deutung der Wellenfunktion für Untersysteme – der sogenannten effektiven bzw. bedingten Wellenfunktion – ist der Inhalt von [29]. Für ein System mit effektiver Wellenfunktion ψ mit¹ $\|\psi\| = 1$ ist $q(t, q_0)$ ein stochastischer Prozeß auf den Anfangsbe-

¹Die Annahme $\|\psi\| = 1$ stellt keine Einschränkung der Allgemeinheit dar, weil mit ψ auch $c\psi$, $c \in \mathbb{C}$ Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung ist und dasselbe Geschwindigkeitsfeld $v^{c\psi} = v^\psi$ erzeugt

dingungen q_0 mit Wahrscheinlichkeitsmaß \mathbb{P}^ψ mit Dichte $|\psi|^2$ wobei $q(t, q_0)$ Lösung ist von 2.2 mit 2.1, 2.3 und $q(0, q_0) = q_0$.

Es folgt aus der Quantenfluß-Gleichung

$$\nabla \mathbf{j}^{\psi_t}(q) + \frac{d}{dt} |\psi_t(q)|^2 = 0, \quad (2.4)$$

daß das Wahrscheinlichkeitsmaß \mathbb{P}^ψ mit Dichte $|\psi|^2$ „äquivariant“ ist, d.h.

$$\mathbb{P}^\psi(Q(t) \in G) = \mathbb{P}^\psi(\{q_0 | Q(t, q_0) \in G\}) = \mathbb{P}^{\psi_t}(\{q_0 | Q(0, q_0) \in G\}) \quad (2.5)$$

für alle meßbaren $G \subset \mathbb{R}^{3N}$.

Wir werden uns fast ausschließlich mit Untersystemen mit nur einem Teilchen befassen. In Einheiten, für die $\hbar = 1$ und $m = 1$ ist, lauten dann die Gleichungen:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) = \mathbf{v}^{\psi_t}(\mathbf{x}(t)) = \text{Im} \frac{\nabla \psi_t}{\psi_t}(\mathbf{x}(t)), \quad (2.6)$$

wobei ψ_t Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_t = \left(-\frac{1}{2} \Delta + V\right) \psi_t \quad (2.7)$$

ist.

Beispiel 2.1 zur Äquivarianz

Ein Elektron im Grundzustand des Wasserstoffatoms ruht, denn die Wellenfunktion ψ_{1s} ist reell, und damit ist $v^{\psi_{1s}} = 0$ (vgl. Zitat auf S. 12). Was bedeutet hier die $|\psi|^2$ -Statistik für die Ortsverteilung? Diese bezieht sich auf ein Ensemble von Systemen mit gleicher Wellenfunktion ψ . Dann sind die Orte $|\psi|^2$ -verteilt.

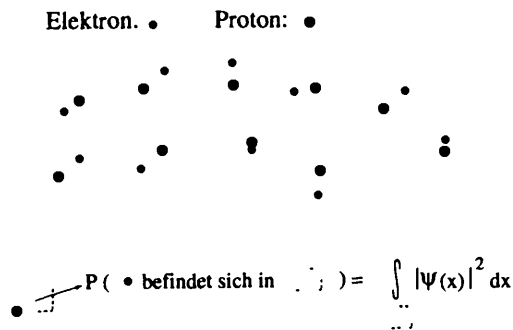


Abbildung 2.1: Ein Ensemble von Wasserstoffatomen im Grundzustand. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons ist durch die $|\psi|^2$ -Statistik gegeben.

Beispiel 2.2 zum Zerfließen eines Wellenpaketes

Ein freies GAUSSSches Wellenpaket „zerfließe“ gemäß 1.15. Das Punktteilchen „zerfließt“ natürlich nicht, sondern bewegt sich gemäß dem Geschwindigkeitsfeld, das von der Wellenfunktion erzeugt wird. Es ergibt sich leicht aus 1.15, 2.6 und 2.7 (Details siehe in [44]) die Differentialgleichung für die Geschwindigkeit $\frac{dx}{dt} = xt(1 + \frac{t^2}{4\sigma_0^4})^{-1}$ mit Lösung $x(t) = x_0(1 + \frac{t^2}{4\sigma_0^4})^{1/2}$. Aufgrund der GALILEI-Invarianz folgt für ein mit Geschwindigkeit v_0 bewegtes Paket

$$x(t) = v_0 t + x_0 \sqrt{1 + \frac{t^2}{4\sigma_0^4}} \quad (2.8)$$

Für den speziellen Fall $v_0 \parallel x_0$ ergibt sich für das Verhalten von $x(t)$ folgendes Bild:

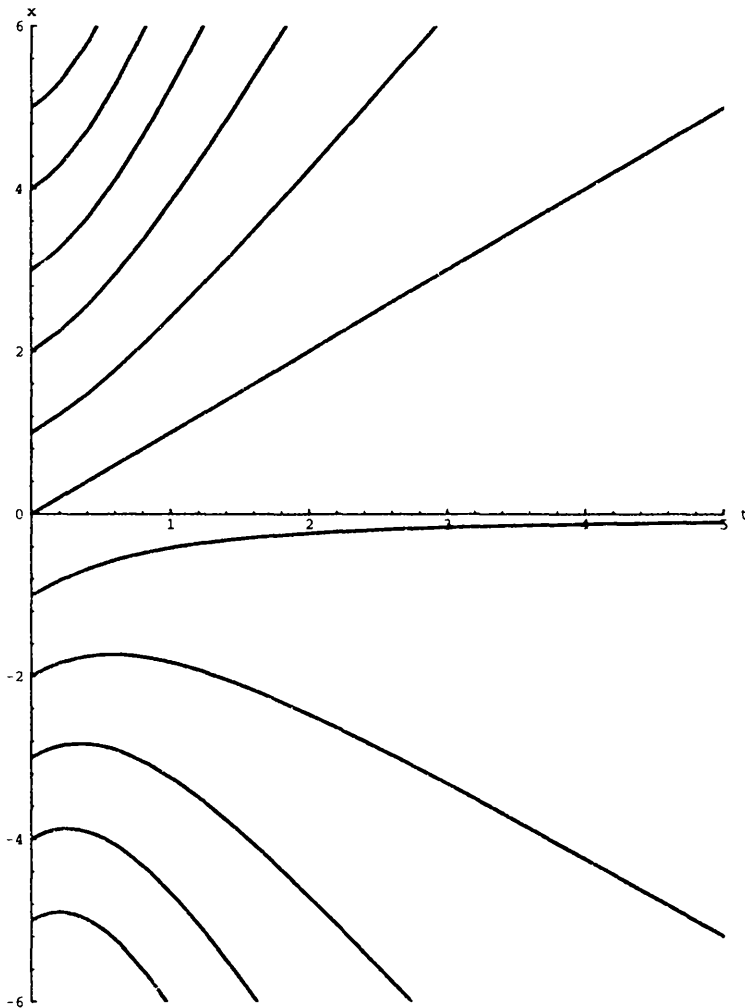


Abbildung 2.2: Trajektorien eines zerfließenden GAUSSSchen Wellenpaketes.

Unabhängig vom Anfangsort bewegt sich das Teilchen anfangs mit der Geschwindigkeit \mathbf{v}_0 , die sich dann, außer für den speziellen Wert $\mathbf{x}_0 = 0$, laufend ändert. Trotz „freier“ Bewegung bewegen sich die Teilchen auf gekrümmten Bahnen, was den nicht-NEWTONSchen Charakter dieser Mechanik sehr schön verdeutlicht. (Die „meisten“ Bahnen befinden sich jedoch in der Nähe der geradlinigen Bahn – entsprechend der $|\psi|^2$ -Statistik, was aus der Zeichnung nicht ersichtlich ist). Es kann auch Richtungsumkehr eintreten, die dazu führt, daß etwa Kugeloberflächen mehrfach gekreuzt werden, was für die Streutheorie eine Rolle spielen wird. Allerdings existiert eine konstante Grenzgeschwindigkeit $v_\infty := \lim_{t \rightarrow \infty} v^{\psi_t}(\mathbf{x}(t)) = \mathbf{v}_0 + \frac{\mathbf{x}_0}{2\sigma_0^2} = \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{x}(t)/t$, die damit eine ebenfalls GAUSS-verteilte Zufallsvariable – \mathbf{x}_0 ist ja GAUSS-verteilt mit Mittelwert 0 und Breite σ_0 – mit Mittelwert \mathbf{v}_0 und Breite σ_0^{-1} darstellt.

$$\mathbb{P}^\psi(\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{x}(t)/t \in \Delta) = \int_\Delta d^3k |\hat{\psi}_0(\mathbf{k})|^2 \quad (2.9)$$

Wir werden in Kapitel 5.2 zeigen, daß die Statistik der asymptotischen Geschwindigkeit im allgemeinen durch die FOURIER-Transformierte der Wellenfunktion gegeben ist. In der Tat beinhaltet dieses einfache Beispiel nahezu alle wesentlichen Konzepte, die wir später für die Streutheorie entwickeln werden.

Wir müssen noch etwas zur „Existenz der Dynamik“ nachtragen. Wir benötigen, daß die Gleichungen 2.2 mit 2.1 und 2.3 globale Lösungen zu „relevanten“ Anfangswerten q_0, ψ_0 besitzen. Dazu können wir auf die folgenden allgemeinen Resultate hinweisen [8]

Sei dazu der Konfigurationsraum Ω eine offene Teilmenge des \mathbb{R}^{3N} , $H_0 := -\sum_{k=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_k} \Delta_k$ und $H_{min} := H_0 + V$, $V \in C^\infty(\Omega)$, $\mathcal{D}(H_{min}) = C_0^\infty(\Omega)$.

A1: $\Omega \subset \mathbb{R}^{3N}$ offen, $V \in C^\infty(\Omega)$;

A2: H sei eine beliebige selbstadjungierte Erweiterung des Operators H_{min} .

A3: $\psi_0 \in C^\infty(H)$ und $\|\psi_0\| = 1$.

Die Menge $C^\infty(H) := \bigcap_{n=1}^\infty \mathcal{D}(H^n)$ der C^∞ -Vektoren von H ist dicht in $L^2(\Omega)$ und invariant unter der Zeitentwicklung e^{-iHt} .

Satz 2.3 *Es gelte A1-3. Dann gibt es zu $\psi_t := e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi_0$ eine „Version“ $\tilde{\psi} \in C^\infty(\Omega \times \mathbb{R})$, in dem Sinn, daß für alle $t \in \mathbb{R}$ $\tilde{\psi}(q, t) = \psi_t(q)$ für fast alle $q \in \Omega$ ist. Damit ist auch der Strom $j^{\tilde{\psi}_t}(q) = \text{Im}\tilde{\psi}_t^*(q)\nabla\tilde{\psi}_t(q)$ eine C^∞ -Funktion in beiden Variablen*

$\tilde{\psi}(q, t)$ ist eine klassische Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung. Im weiteren Text werden wir $\tilde{\psi}(q, t)$ wieder einfach mit $\psi_t(q)$ bezeichnen.

Wir interessieren uns besonders für N -Teilchen-Systeme mit paarweiser Wechselwirkung. Sei dazu $V(q) = \sum_{i,j=1}^N V_{i,j}(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j)$ mit Funktionen $V_{i,j} = V_{i,j}^{(1)} + V_{i,j}^{(2)}$ mit $V_{i,j}^{(1)} \in L^2(\mathbb{R}^3)$ und $V_{i,j}^{(2)} \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ für $i, j \in \{1 \dots N\}$. Dann ist nach KATO [49]

$H := H_0 + V$ auf $\mathcal{D}(H) = \mathcal{D}(H_0)$ selbstadjungiert. Sei zusätzlich $V \in C^\infty(\Omega)$ mit $\Omega := \mathbb{R}^{3N} \setminus \bigcup_{i,j=1}^N \{\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j\}$. Wir nennen dann H den N -Teilchen-PaarwechselwirkungshAMILTONian. τ bezeichne die Zufallsvariable auf $(\mathbb{R}^{3N}, \mathcal{B}, \mathbb{P}^{\psi_0})$, die jeder Anfangsbedingung $q_0 \in \Omega$ mit $\psi_0(q_0) \neq 0$ den rechten Endpunkt des maximalen Existenzintervalls $[0, \tau(q_0))$ der jeweiligen Trajektorie zuordnet. Die globale Existenz eines stochastischen Prozesses $q(t, q_0)$ bzw. $\mathbf{x}(t, \mathbf{x}_0)$ sichert uns nun

Satz 2.4 Sei H ein N -Teilchen-PaarwechselwirkungshAMILTONian und es gelte A3. Dann ist $\mathbb{P}^{\psi_0}(\tau < \infty) = 0$, d.h. 2.2 mit 2.1 hat eindeutige und global existierende Lösungen für \mathbb{P}^{ψ_0} -fast alle Anfangsbedingungen.

Bemerkung 2.5 Gerade für die Streutheorie ist das COULOMB-Potential von Bedeutung. Darum weisen wir darauf hin, daß das N -Teilchen COULOMB-Potential durch den Satz abgedeckt ist.

Mit diesem Resultat zur globalen Existenz der Dynamik können wir nun getrost $\rho = |\psi|^2$ als Ensembledichte auffassen, die gemäß der Kontinuitätsgleichung 2.4

$$\frac{\partial |\psi_t(\mathbf{x})|^2}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) = 0 \quad (2.10)$$

mit dem Wahrscheinlichkeitsstrom $\mathbf{j}^{\psi_t} = \text{Im } \psi_t^* \nabla \psi_t$ transportiert wird. Wir werden häufig von der bereits erwähnten Äquivarianz Gebrauch machen, insbesondere von

$$\mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}(t) \in G) := \mathbb{P}^\psi(\{\mathbf{x}_0 | \mathbf{x}(t, \mathbf{x}_0) \in G\}) = \int_G d^3x |\psi_t(\mathbf{x})|^2 = \mathbb{P}^{\psi_t}(G) \quad (2.11)$$

für alle meßbaren $G \subset \mathbb{R}^3$. Es geht uns in den folgenden Beispielen hauptsächlich um die physikalische Bedeutung des Zusammenhangs zwischen dem Strom und den Verteilungen der Durchkreuzungsorte und Durchkreuzungszeiten. Die Meßbarkeit und Wohldefiniertheit der relevanten Größen wird in [8] behandelt, so daß wir darauf nicht einzugehen brauchen

Im folgenden sei $H = H_0 + V$ mit V wie in Satz 2.4, $\psi \in C^\infty(H)$ und $G \subset \mathbb{R}^3$ ein Gebiet mit glattem Rand ∂G mit ins Äußere gerichtetem Einheitsnormalenfeld $\nu : \partial G \rightarrow \mathbb{R}^3$.

Beispiel 2.6 Anwendung des GAUSSschen Satzes ergibt

$$\frac{d}{dt} \mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}(t) \in G) = \frac{d}{dt} \int_G d^3x |\psi_t(\mathbf{x})|^2 = - \int_{\partial G} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma. \quad (2.12)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Gebiet G verändert sich gemäß dem ein- oder ausfließenden Strom.

Wir wollen im nächsten Beispiel noch die Zufallsvariablen für Austrittsort, Austrittszeit und Aufenthaltszeit angeben.

Beispiel 2.7 Für ein in G lokalisiertes ψ , $\text{supp}\psi \subset G$, definieren wir die Zeit des ersten Austritts aus G als Abbildung von $G \rightarrow \mathbb{R}^+ \cup \{\infty\}$ als

$$T_e = \inf_{t \geq 0} \{t | \mathbf{x}(t) \in G^c\} \quad (2.13)$$

(mit $G^c := \mathbb{R}^3 \setminus G$) und den dazugehörigen Austrittsort als Abbildung von $G \rightarrow \partial G \cup \{\infty\}$

$$\mathbf{x}_e := \mathbf{x}_{T_e} \quad (2.14)$$

und setzen $\mathbf{x}_e := \infty$, falls $T_e = \infty$. Die gesamte Aufenthaltsdauer in G ist

$$T_s := \int_0^\infty dt \chi_G(\mathbf{x}(t)) \quad (2.15)$$

T_e, \mathbf{x}_e und T_s sind Zufallsvariablen auf G mit Maß \mathbb{P}^ψ . Falls $\lim_{t \rightarrow \infty} \|P_G \psi_t\| = 0$, sind T_e und X_e \mathbb{P}^ψ -fast sicher endlich, denn

$$0 \leq \mathbb{P}^\psi(T_e = \infty) = \mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}(t) \in G \forall t \geq 0) \leq \mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}(s) \in G) = \|P_G \psi_s\|^2 \rightarrow 0 \quad (2.16)$$

für $s \rightarrow \infty$, und damit ist $\mathbb{P}^\psi(T_e = \infty) = 0$. Damit ist T_e und auch \mathbf{x}_e \mathbb{P}^ψ -fast sicher endlich.

Es ist offenbar $T_s \geq T_e$, und $T_s = T_e$ genau dann, wenn die Oberfläche genau einmal von innen nach außen von jeder möglichen Trajektorie gekreuzt wird. Dies ist richtig, falls die „current positivity condition“ [21] für G und ψ

$$\text{CPC: } \forall t \in [0, \infty), \mathbf{x} \in \partial G : \mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu(\mathbf{x}) \geq 0 \quad (2.17)$$

erfüllt ist.

Es ist

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(T_s) &= \int_0^\infty dt \mathbb{E}(\chi_G(\mathbf{x}(t))) \\ &= \int_0^\infty dt \mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}(t) \in G) \\ &= \int_0^\infty dt \|P_G \psi_t\|^2 = \int_0^\infty dt \int_G d^3x |\psi_t(\mathbf{x})|^2, \end{aligned} \quad (2.18)$$

wobei wir von der Äquivarianz Gebrauch machten. Insbesondere ist T_s \mathbb{P}^ψ -fast sicher endlich, falls $\int_0^\infty dt \|P_G \psi_t\|^2 < \infty$.

Bemerkung 2.8 Diese statistischen Vorhersagen über die Austrittszeiten und Austrittsorte haben keine Entsprechung in der Standard-Quantenmechanik und sind „neue Vorhersagen“ der BOHMschen Mechanik, wie etwa in [21] und [51] diskutiert wird. Das Problem der Zeitmessungen in der Quantenmechanik wird sehr ausführlich in ALCOCK [2] dargestellt, und erscheint in [55] in Form des „Quanten-ZENO-Paradoxons“.

Die Statistik von T_e, \mathbf{x}_e und T_s ist übrigens im allgemeinen *nicht* durch einen selbst-adjungierten Operator gegeben. Für den Erwartungswert von T_s kann nach 2.18 zwar der „Mittelwerts-Operator“ $\hat{t}_s := \int_0^\infty dt P_G(t)$ eingeführt werden, so daß $\mathbb{E}(T_s) = (\psi, \hat{t}_s \psi)$. Wie in Beispiel 1.1 gezeigt wurde, gibt das Spektralmaß von \hat{t}_s im allgemeinen aber nicht die statistische Verteilung von T_s , wieder

Falls die CPC erfüllt ist, ergibt sich, daß die Statistik von T_e, \mathbf{x}_e und $T_s (= T_e$ unter der CPC) durch ein POV gegeben ist. (Damit sind diese Größen im Prinzip auch meßbar, wie in [20] allgemein gezeigt wird.)

Wir haben nun Ort und Zeit des *ersten* Austritts aus einer geschlossenen Fläche definiert. Eine weitere wichtige Größe ist die Anzahl von Kreuzungen einer Fläche, deren Erwartungswert eng mit dem Strom verknüpft ist.

Beispiel 2.9 Wir definieren die Gesamtzahl der Kreuzungen der Fläche $\Delta \subset \partial G$ und die Anzahl der Auswärtskreuzungen im Zeitintervall $[0, \infty)$

$$N_{tot}^\Delta := \#\{t \geq 0, \mathbf{x}(t) \in \Delta\} \quad (2.19)$$

$$N_+^\Delta := \#\{t \geq 0; \mathbf{x}(t) \in \Delta, \frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) \cdot \nu(\mathbf{x}(t)) > 0\}. \quad (2.20)$$

Falls $N_+^\Delta < \infty$ und $N_{tot}^\Delta < \infty$, definieren wir für die Anzahl der Rückwärtskreuzungen und die Anzahl der signierten Kreuzungen

$$N_-^\Delta := N_{tot}^\Delta - N_+^\Delta \quad (2.21)$$

$$N_{sgn}^\Delta := N_+^\Delta - N_-^\Delta \quad (2.22)$$

Es ist heuristisch klar (und wird in [8] rigoros gezeigt), daß der Erwartungswert der Gesamtanzahl N_{tot}^Δ von Kreuzungen der Fläche Δ im Zeitintervall $[0, \infty)$ durch

$$\mathbb{E}(N_{tot}^\Delta) = \int_0^\infty dt \int_\Delta |\mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu| d\sigma \quad (2.23)$$

gegeben ist. Der Erwartungswert der Anzahl der signierten Kreuzungen N_{sgn}^Δ der Fläche Δ im Zeitintervall $[0, \infty)$ ist

$$\mathbb{E}(N_{sgn}^\Delta) = \int_0^\infty dt \int_\Delta \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma \quad (2.24)$$

Kapitel 3

Streutheorie mit Trajektorien – Physikalische Heuristik

Wir analysieren nun Streuung im Rahmen BOHMScher Mechanik. Die umfangreiche Literatur zur Streutheorie (siehe etwa [37], [58] und [66]) beschäftigt sich zu einem großen Teil mit der elastischen Streuung zweier Teilchen. Dieses Problem kann durch eine Standard-Transformation auf Relativkoordinaten auf das Problem der Streuung eines Teilchens an einem Potential umformuliert werden (siehe etwa [66], S. 55f). Wir wollen uns ausschließlich in diesem Rahmen bewegen (siehe jedoch Kap. 5.3).

Wir betrachten also die Streuung eines Teilchens an einem Potential $V(\mathbf{x})$ mit Zentrum im Ursprung. Das Teilchen bewegt sich, nachdem die Anfangswellenfunktion ψ zur Zeit $t = 0$ präpariert wurde, innerhalb des Wellenpaketes ψ_t auf das Streuzentrum zu, wird an dem Potential gestreut, und entfernt sich dann ins Unendliche¹. Die Aufgabe der Streutheorie besteht nun darin, die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Austrittsorte \mathbf{x}_e (siehe Beispiel 2.7) der Bahnen auf einer Oberfläche, die das Streuzentrum umschließt, anzugeben. Wir nehmen dabei an, daß Detektoren Ort und Zeit des Teilchendurchgangs durch beliebige Oberflächen anzeigen können, so daß wir die Wechselwirkung mit den Meßapparaten nicht miteinbeziehen müssen. Falls die statistische Verteilung dieser Größen durch ein POV gegeben ist, gibt es – zumindest im Prinzip – solche Messungen, wie in [20] ganz allgemein gezeigt wird. Kenntnis dieser Durchgangswahrscheinlichkeit erlaubt es also, die theoretischen Vorhersagen mit einem Experiment zu testen, oder aber, unter der Annahme der Richtigkeit der Theorie, Informationen über das Streupotential zu erhalten, was als „inverses Streuproblem“ bezeichnet wird. Tatsächlich ist die Streutheorie eines der wichtigsten Werkzeuge an der Schnittstelle zwischen Theorie und Experiment.

¹Daß das Wellenpaket das Teilchen mit sich führt, folgt sofort aus den Bewegungsgleichungen, oder, noch bildlicher, aus der Äquivarianz.

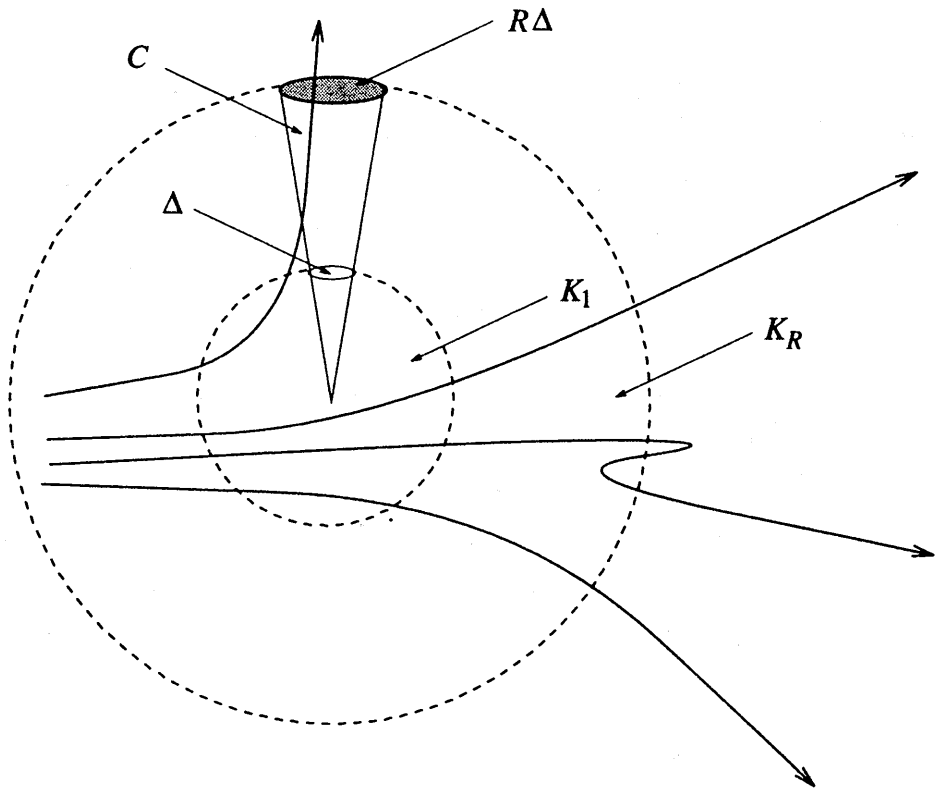


Abbildung 3.1: Die Bahnen entsprechen möglichen Bahnen der Teilchen für ein einlaufendes Wellenpaket. Das Streuzentrum befindet sich in der Kugelmitte.

Als Oberflächen wählen wir der Einfachheit halber Kugeloberflächen. Für den ganzen Rest der Arbeit wollen wir die folgenden Bezeichnungen verwenden: Sei für $R > 0$ $K_R := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : x \leq R\}$ und $\partial K_R = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : x = R\}$. Weiter sei $\nu : \partial K_R \rightarrow \mathbb{R}^3$, $\nu(\mathbf{x}) := \frac{\mathbf{x}}{x}$ (für $R > 0$) die ins Äußere gerichtete Einheitsnormale auf der Kugeloberfläche ∂K_R . Den durch eine Teilmenge $\Delta \subset S^2 := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : x = 1\}$ der Einheitskugel aufgespannten Kegel bezeichnen wir mit $C := \{\lambda \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : \mathbf{x} \in \Delta, \lambda \geq 0\}$ und seinen Schnitt mit der Kugeloberfläche ∂K_R mit $R\Delta := C \cap \partial K_R = \{R\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : \mathbf{x} \in \Delta\}$. Eine andere Kegel-Charakterisierung ist durch den Einheitsnormalenvektor \mathbf{n}_C mit $\|\mathbf{n}_C\| = 1$ und den Öffnungswinkel $\theta_C \in [0, \pi]$ gegeben, nämlich $C := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : \mathbf{x} \cdot \mathbf{n}_C > x \cos \theta_C\}$. Wir wählen ein Polarkoordinatensystem (r, θ, ϕ) , $r \geq 0, \theta \in [0, \pi], \phi \in [0, 2\pi)$ im Ursprung, $\mathbf{x}(r, \theta, \phi) = (r \sin \theta \cos \phi, r \sin \theta \sin \phi, r \cos \theta)$, mit z -Richtung \mathbf{n}_C . In diesen Polarkoordinaten gilt $K_R = \{(r, \theta, \phi) : r \leq R\}$, $\partial K_R = \{(r, \theta, \phi) : r = R\}$ und $C = \{(r, \theta, \phi) : \theta < \theta_C\}$. Der Schnitt des Kegels C mit der Kugeloberfläche ∂K_R ist damit $C \cap \partial K_R = \{(r, \theta, \phi) : r = R, \theta < \theta_C\}$ mit ins Äußere gerichteter Einheitsnormalen $\nu(\theta, \phi) = R^{-1}\mathbf{x}(R, \theta, \phi)$. Mit $d\Omega$ bezeichnen wir den Raumwinkel, d.h. $\int_C d\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\theta_C} \sin \theta d\theta$.

Die *gesamte* relevante Streustatistik ist nun also in der Wahrscheinlichkeit $\mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}_e \in R\Delta)$ zusammengefaßt.

In einem typischen Streuexperiment sind Detektoren in – verglichen mit der Reichweite des Potentials – großer, aber nicht genauer bestimmten Entfernung vom Streuzentrum angebracht. Man wird annehmen, daß die Formel „unabhängig“ von R wird für große R , d.h. wir interessieren uns besonders für die Abbildung $\sigma : \mathcal{B}(S^2) \rightarrow \mathbb{R}^+$ gegeben durch

$$\sigma(\Delta) := \lim_{R \rightarrow \infty} \mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}_e \in R\Delta) = \lim_{R \rightarrow \infty} \mathbb{P}^\psi\left(\frac{\mathbf{x}_e}{x_e} \in \Delta\right), \quad (3.1)$$

wobei $\frac{\mathbf{x}_e}{x_e}$ die Austrittsrichtung ist, die wir als Wahrscheinlichkeitsmaß auf der Einheits-sphäre betrachten wollen: das „Streuquerschnittsmaß“².

Im allgemeinen können die Trajektorien die Kugeloberfläche ∂K_R mehrmals durchstoßen, wie in der Abbildung 3.1 angedeutet ist. Wir haben nun bereits eine Formel für die erwartete Anzahl $N_{tot}^{R\Delta} = N_+^{R\Delta} + N_-^{R\Delta}$ von Kreuzungen und für die erwartete Anzahl von signierten Kreuzungen $N_{sgn}^{R\Delta} := N_+^{R\Delta} - N_-^{R\Delta}$ der Fläche $R\Delta$ im Zeitintervall $[0, \infty)$, nämlich

$$\mathbb{E}(N_{tot}^{R\Delta}) = \int_0^\infty dt \int_{R\Delta} |\mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu| d\sigma \quad (3.2)$$

$$\mathbb{E}(N_{sgn}^{R\Delta}) = \int_0^\infty dt \int_{R\Delta} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma. \quad (3.3)$$

Die Wahrscheinlichkeit für Mehrfachkreuzungen sollte natürlich bei großen Entfernungen verschwinden, d.h. die Bewegung sollte asymptotisch rein nach außen gerichtet sein, ähnlich dem Beispiel des freien GAUSSSchen Wellenpaketes in Abb. 2.2. Diese Vorstellung wurde auch in [17] geäußert, worin gleichzeitig auf die tatsächliche Meßbarkeit mit Detektoren hingewiesen wird:

We shall be interested in the limit as $R \rightarrow \infty$. At large distances the scattering part of the wave function contains outgoing particles only. Therefore the particles cannot describe loops there and the flux can be measured by the interposition of counters on ∂K_R .

COMBES, NEWTON und SHTOKHAMER

Wir erwarten also, daß für große R , jede Teilfläche $R\Delta$ höchstens einmal – und dann von innen nach außen – gekreuzt wird. Die Anzahl $N_+^{R\Delta}$ der Auswärtskreuzungen von $R\Delta$ im Zeitintervall $[0, \infty)$ kann nur die Werte 0 oder 1 annehmen – damit wird der Erwartungswert gleich der Wahrscheinlichkeit – und Rückwärtskreuzungen treten nicht

²Diese Definition ist ähnlich der Definition des Streuquerschnitts in der klassischen Mechanik (siehe [66] S. 15 und Bem. 5.8). Für gebundene Zustände oder „singuläre“ Zustände (siehe Kap. 5.5) existiert der Grenzwert $R \rightarrow \infty$ in 3.1 nicht oder er definiert kein Wahrscheinlichkeitsmaß.

auf. Es ist leicht eine Bedingung anzugeben, die dieses Verhalten garantiert, die „current positivity condition“ (siehe Beispiel 2.17)

$$\text{CPC} \cdot \forall t \in [0, \infty), \mathbf{x} \in \partial K_R \cdot \mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) \geq 0 \quad (3.4)$$

Falls also $\lim_{R \rightarrow \infty} \mathbb{E}(N_{-}^{\partial K_R}) = 0$, erhalten wir für die Wahrscheinlichkeit dafür, daß eine Trajektorie die Fläche $R\Delta$ von innen nach außen durchstößt,

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \mathbb{P}^{\psi}(\mathbf{x}_e \in R\Delta) = \lim_{R \rightarrow \infty} \mathbb{E}(N_{tot}^{R\Delta}) = \lim_{R \rightarrow \infty} \mathbb{E}(N_{sgn}^{R\Delta}) = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} dt \int_{R\Delta} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma \quad (3.5)$$

Unter diesen Bedingungen gilt dann für das Streuquerschnittsmaß³

$$\sigma(\Delta) = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} dt \int_{R\Delta} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} dt \int_{R\Delta} |\mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu| d\sigma. \quad (3.7)$$

Wellenfunktionen, für die durch 3.7 ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf der Einheitssphäre definiert ist, wollen wir „Streuzustände“ nennen (siehe Kap. 5.5).

Damit ist Streutheorie – was die Zwei-Teilchen-Streuung angeht – komplett erfaßt! Wir wollen aber nun versuchen, für die rechte Seite in 3.7 einen Ausdruck zu finden, der leichter handhabbar ist, und in der Tat mit den üblichen Formeln der Streutheorie verknüpft. Das geschieht im folgenden und ist auch der eigentliche Inhalt dieser Arbeit.

Wir nehmen zunächst den einfachsten Fall $V = 0$, bei dem sich die Wellenfunktion $\psi_t = e^{-iH_0 t} \psi$ frei entwickelt. Nach 1.2 haben wir die explizite Darstellung

$$\psi_t(\mathbf{x}) = (e^{-iH_0 t} \psi)(\mathbf{x}) = \int d^3 y \frac{e^{i \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{2t}}}{(2\pi i t)^{3/2}} \psi(\mathbf{y}) \quad (3.8)$$

Die erste direkte Folgerung daraus ist, daß die Aufenthaltswahrscheinlichkeit (für $\psi \in L^1(\mathbb{R}^3)$) in einem beschränkten Gebiet wie t^{-3} fällt, denn $\mathbb{P}^{\psi}(\mathbf{x}(t) \in G) = \int_G d^3 x |\psi_t(\mathbf{x})|^2 = O(t^{-3})$. Also gilt dann insbesondere $\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P}(\mathbf{x}(t) \in G) = 0$, d.h. das Teilchen verläßt mit Wahrscheinlichkeit 1 jedes beschränkte Gebiet. Indem wir 3.8 als

$$\psi_t(\mathbf{x}) = \frac{e^{i \frac{\mathbf{x}^2}{2t}}}{(it)^{3/2}} \hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) + \frac{e^{i \frac{\mathbf{x}^2}{2t}}}{(it)^{3/2}} \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}}{t}} (e^{i \frac{\mathbf{y}^2}{2t}} - 1) \psi(\mathbf{y}) \quad (3.9)$$

schreiben, sehen wir unter Vernachlässigung des zweiten Terms, daß für $t \rightarrow \infty$ (die L^2 -Norm der Differenz verschwindet, vgl. 1.3)

$$\psi_t(\mathbf{x}) \rightarrow (it)^{-3/2} e^{i \frac{\mathbf{x}^2}{2t}} \hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right). \quad (3.10)$$

³Die Maßeigenschaft kommt von der Maßeigenschaft des Integrals, und die Normierung

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} dt \int_{\partial K_R} \mathbf{j}_t \cdot d\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P}^{\psi}(K_R) - \mathbb{P}^{\psi_t}(K_R) = 1 \quad (3.6)$$

gilt, falls $\lim_{t \rightarrow \infty} \int d^3 x |\psi_t(\mathbf{x})|^2 = 0$, also das Teilchen die Kugel mit Sicherheit verläßt

(Die Relevanz dieser Asymptotik für die Zwecke der Streutheorie wurde insbesondere von DOLLARD [24] sowie BRENIG und HAAG [10] betont.) Nun betrachten wir einen Kegel C ; mit der Variablensubstitution $\mathbf{v} := \frac{\mathbf{x}}{t}$ haben wir sofort

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_C d^3x |\psi_t(\mathbf{x})|^2 = \int_C d^3v |\hat{\psi}(\mathbf{v})|^2. \quad (3.11)$$

3.11 ist der Inhalt des „Scattering-into-Cones“-Satzes von DOLLARD für den freien Fall [24]

Was ist nun die Bedeutung von dieser Aussage für die Streutheorie? Die linke Seite von 3.11 ist der Grenzwert $t \rightarrow \infty$ der Wahrscheinlichkeit dafür, daß sich das Teilchen zur Zeit t im Kegel C befindet. In einem Streuexperiment wird aber *nicht*, nach einer hinreichend langen, vom Experimentator wählbaren Zeit, die Wahrscheinlichkeit bestimmt, daß sich das Teilchen in einem Kegel befindet. Vielmehr, wie wir anfangs sagten, klickt ein Detektor zu einer *zufälligen* Zeit an einem *zufälligen* Ort, eben gerade zu der Zeit und an dem Ort, an dem das Teilchen ankommt (\mathbf{x}_e und T_e aus Beispiel 2.7). Für die Zwecke der Streutheorie ist also die Relevanz des „Scattering-into-Cones“-Satzes unklar, denn wir brauchen ja die (asymptotische) Verteilung der Austrittsorte auf Kugeloberflächen. Ein Vergleich von 3.11 und 3.7 legt nun nahe, durch eine einfache Anwendung des GAUSSSchen Satzes auf einen Kegelstumpf aus dem „Scattering-into-Cones“-Satz die Formel

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{R\Delta} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma = \int_C d^3v |\hat{\psi}(\mathbf{v})|^2 \quad (3.12)$$

zu erhalten. $C_{r,R} := C \cap K_r^c \cap K_R$ bezeichne den Kegelstumpf mit ins Äußere gerichteten Flächennormale ν , und $M_{r,R} := \partial C \cap K_r^c \cap K_R$ die Mantelfläche. Anwendung des GAUSSSchen Satzes ergibt

$$\begin{aligned} \|P_{C_{r,R}} \psi\|^2 - \|P_{C_{r,R}} \psi_T\|^2 &= - \int_0^T dt \frac{d}{dt} \|P_{C_{r,R}} \psi_t\|^2 \\ &= \int_0^T dt \int_{C \cap \partial K_r} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma + \int_0^T dt \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma + \int_0^T dt \int_{M_{r,R}} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma \end{aligned}$$

Da $\lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{R \rightarrow \infty} \|P_{C_{r,R}} \psi_T\| = \lim_{T \rightarrow \infty} \|P_{C_{r,\infty}} \psi_T\| = \lim_{T \rightarrow \infty} \|P_C \psi_T\|$ unabhängig von r ist, und $\lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{R \rightarrow \infty} \|P_{C_{r,R}} \psi\| = 0$, folgt aus 3.11 das Resultat 3.12 *falls*

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^T dt \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma = 0 \quad (3.13)$$

und

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^T dt \int_{M_{r,R}} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma = 0 \quad (3.14)$$

ist, wobei der Fluß durch den Kegelmantel $M_{r,R}$ das eigentliche Problem darstellt⁴.

⁴Dieser Weg wurde in [17] mit Operator-Methoden versucht

Es zeigt sich jedoch, daß es einfacher ist, den Strom direkt zu berechnen. Aus 3.8 ergibt sich für $t \rightarrow \infty$

$$\mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) = \text{Im} \psi_t^*(\mathbf{x}) \nabla \psi_t(\mathbf{x}) \approx \frac{\mathbf{x}}{t} t^{-3} |\hat{\psi}(\frac{\mathbf{x}}{t})|^2, \quad (3.15)$$

und wir sehen, daß der Strom für große Zeiten nach außen gerichtet ist, also parallel zur Flächennormale ν von ∂K_R . Da mit wachsendem Kugelradius auch die Zeit wächst, bis die Teilchen die Kugeloberfläche ∂K_R kreuzen, erwarten wir, daß die Wahrscheinlichkeit von Rückwärtskreuzungen von ∂K_R im Grenzfall $R \rightarrow \infty$ verschwindet. Nun zu 3.7. Mit der Näherung 3.15 findet man mit der Variablensubstitution $\mathbf{v} := \frac{\mathbf{x}}{t}$, daß

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dt \int_{R\Delta} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma &= \int_0^\infty dt \int_{R\Delta} |\mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu| d\sigma \approx \int_0^\infty dt \int_{R\Delta} t^{-3} |\hat{\psi}(\frac{\mathbf{x}}{t})|^2 \frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \nu(\mathbf{x}) d\sigma \\ &= \int_0^\infty dv v^2 \int_C d\Omega |\hat{\psi}(\mathbf{v})|^2 = \int_C d^3 v |\hat{\psi}(\mathbf{v})|^2. \end{aligned} \quad (3.16)$$

(Man beachte, daß das Ergebnis unabhängig von R ist.) Damit kommen wir zum fundamentalen „Flux-across-Surfaces“-Satz⁵:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} |\mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu| d\sigma = \int_C d^3 v |\hat{\psi}(\mathbf{v})|^2. \quad (3.18)$$

Somit ergibt sich für die asymptotische Austrittsrichtung

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}_e \in R\Delta) = \int_C d^3 v |\hat{\psi}(\mathbf{v})|^2. \quad (3.19)$$

Wir bemerken noch, daß mit der asymptotischen Formel für ψ_t und \mathbf{j}^{ψ_t} für das asymptotische Geschwindigkeitsfeld

$$\mathbf{v}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \approx \frac{\mathbf{x}}{t} \quad (3.20)$$

gilt. Die Teilchen, die sich zur Zeit t an der Stelle \mathbf{x} befinden, besitzen dort die vom Ursprung weggerichtete Geschwindigkeit \mathbf{x}/t , was einer klassischen Bewegung mit konstanter, nach außen gerichteter Geschwindigkeit entspricht. Die Verteilung dieser asymptotischen Geschwindigkeiten wird durch $|\hat{\psi}(\mathbf{v})|^2$ gegeben sein (siehe Kap. 5.2).

Nun wenden wir uns dem Potentialfall zu. Nach einer hinreichend langen Zeit sollte das Teilchen weit weg vom Streuzentrum sein – falls das Potential schnell genug abfällt – und sich dort also geradlinig nach außen bewegen. Der Träger der Wellenfunktion sollte also

⁵In [17] wird folgende Beziehung als „Flux-across-Surfaces“-Satz bezeichnet

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_C d^3 x |\psi_t(\mathbf{x})|^2 \quad (3.17)$$

Dies ist zusammen mit dem „Scattering-into-Cones“-Satz natürlich mit unserer Formulierung des „Flux-across-Surfaces“-Satzes (fast) äquivalent. Unsere Formulierung des „Flux-across-Surfaces“-Satzes erlaubt es, direkt auf die asymptotische Verteilung der Austrittsorte zu schließen (siehe 3.19)

für große Zeiten außerhalb des Streuzentrums konzentriert sein, und die Wellenfunktion sollte sich dort im wesentlichen frei entwickeln. Wir können daher eine Entwicklung nach Eigenfunktionen $|\mathbf{k}\rangle$ von H ansetzen (die sich asymptotisch wie die FOURIER-Entwicklung, die bei $H = H_0$ auftritt, verhalten sollte), wobei $H|\mathbf{k}\rangle = \frac{k^2}{2}|\mathbf{k}\rangle$ und

$$\psi_t(\mathbf{x}) := \langle \mathbf{x} | e^{-iHt} | \psi \rangle = \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | \psi \rangle \quad (3.21)$$

Um das asymptotische FOURIER-Verhalten herauszukristallisieren, setzen wir

$$(2\pi)^{3/2} \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle =: e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \eta(\mathbf{x}, \mathbf{k}), \quad (3.22)$$

so daß mit $\langle \mathbf{k} | \psi \rangle =: \psi^\#(\mathbf{k}) =: \widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k})$

$$(e^{-iH_0 t} U_+ \psi)(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k}). \quad (3.23)$$

Wir suchen nun ein Entwicklungssystem, derart daß

$$\eta(\mathbf{x}, t) := (e^{-iHt} \psi)(\mathbf{x}) - (e^{-iH_0 t} U_+ \psi)(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \eta(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k}) \quad (3.24)$$

für große Zeiten und Abstände nichts beiträgt. Die gesamte Information über das Potential steckt damit in $\widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k})$.

Wie finden wir solch eine Eigenfunktionsentwicklung? Das Verschwinden der L^2 -Norm des Restterm im Limes $t \rightarrow \infty$ ($\lim_{t \rightarrow \infty} \|\eta(\cdot, t)\|_2 = 0$) liefert die Bedingung

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|e^{-iH_0 t} U_+ \psi - e^{-iHt} \psi\| = 0, \quad (3.25)$$

also die Existenz⁶ von $U_+ = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} e^{iH_0 t} e^{-iHt}$. Dieser Zusammenhang zwischen U_+ und der Eigenfunktionsentwicklung erlaubt es uns, eine rekursive Formel für die Eigenfunktionen zu finden.

Zuerst streben wir eine Darstellung von U_+ als Integralkern an (siehe auch [66], S. 98ff). Mit $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$ und $\widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k}) =: \langle \mathbf{k} | U_+ | \psi \rangle = \langle \mathbf{k} | \psi \rangle = \psi^\#(\mathbf{k})$ schreiben wir

$$\begin{aligned} |\mathbf{k}\rangle &= U_+ |\mathbf{k}\rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} e^{iH_0 t} e^{-iHt} |\mathbf{k}\rangle \\ &= |\mathbf{k}\rangle - i \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t ds e^{iH_0 s} V e^{-iHs} |\mathbf{k}\rangle && \text{(Differentiation nach } t) \\ &= |\mathbf{k}\rangle - i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty ds e^{-\epsilon s} e^{iH_0 s} V e^{-i\frac{k^2}{2}s} |\mathbf{k}\rangle && \text{(ABELScher Grenzwert)} \\ &= |\mathbf{k}\rangle + (H_0 - (\frac{k^2}{2} - i\epsilon))^{-1} V |\mathbf{k}\rangle. \end{aligned} \quad (3.26)$$

⁶Für typische Streuprobleme ist U_+ unitär auf dem absolutstetigen Teilraum von \mathcal{H} (siehe Kap 5 6 und Kap 5.5)

Also ist

$$(2\pi)^{3/2} \langle \mathbf{x} | \widehat{\mathbf{k}} \rangle = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \frac{1}{2\pi} \int d^3y \frac{e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} V(\mathbf{y}) \langle \mathbf{y} | \widehat{\mathbf{k}} \rangle, \quad (3.27)$$

wobei wir die Resolvente von H_0 als Integralkern geschrieben haben (siehe 1.4). Diese Gleichung heißt LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung [52] und ist eine implizite Gleichung für die Eigenfunktionen.

Wir erkennen nun, daß die Funktionen $(2\pi)^{3/2} \langle \mathbf{x} | \widehat{\mathbf{k}} \rangle$ tatsächlich die gewünschte Struktur $(2\pi)^{3/2} \langle \mathbf{x} | \widehat{\mathbf{k}} \rangle = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \eta(\mathbf{k}, \mathbf{x})$ haben. Für große Werte von x können wir $|\mathbf{x}-\mathbf{y}| \approx x$ setzen, so daß $\frac{e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \approx \frac{e^{-ikx}}{x}$ gilt. Also ist $(2\pi)^{3/2} \langle \mathbf{x} | \widehat{\mathbf{k}} \rangle \approx e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \frac{e^{-ikx}}{x} f(\mathbf{k}, \mathbf{x})$, mit einer vom Potential abhängigen Funktion f (vgl. Kap. 5.4). Ein stationäres Phasen-Argument zeigt, daß der Restterm in 3.24

$$\eta(\mathbf{x}, t) \approx (2\pi)^{-3/2} \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \frac{e^{-ikx}}{x} f(\mathbf{k}, \mathbf{x}) \widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k}) \quad (3.28)$$

für $t \rightarrow \infty$ verschwindet, denn es gibt keine stationären Punkte in dem schnell oszillierenden Phasenfaktor $e^{-i\frac{k^2 t}{2}} e^{-ikx}$ außer bei $k = 0$. Der Beitrag von einer Umgebung von $k = 0$ sollte aber bei nichtsingulärem Verhalten des Integranden vernachlässigbar sein (siehe Bem. 5.10).

$\psi_t(\mathbf{x})$ verhält sich also für große Zeiten wie

$$\psi_t(\mathbf{x}) \approx e^{-iH_0 t} U_+ \psi = (2\pi)^{-3/2} \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k}). \quad (3.29)$$

Damit ist das Problem der Bewegung mit Wechselwirkung auf das freie Problem zurückgeführt, d.h. der „Scattering-into-Cones“-Satz besagt im allgemeinen Fall, daß

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}(t) \in C) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_C d^3x |\psi_t(\mathbf{x})|^2 = \int_C d^3k |\widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k})|^2. \quad (3.30)$$

Entsprechend lautet der „Flux-across-Surfaces“-Satz im allgemeinen Fall:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} |\mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu| d\sigma = \int_C d^3k |\widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k})|^2 \quad (3.31)$$

Das Streuquerschnittsmaß ist damit

$$\sigma(\Delta) = \lim_{R \rightarrow \infty} \mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}_e \in R\Delta) = \int_C d^3k |\widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k})|^2, \quad (3.32)$$

so daß der „differentielle Streuquerschnitt“ durch

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int_0^\infty dk k^2 |\widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k})|^2. \quad (3.33)$$

gegeben ist. Diese Formeln sind im wesentlichen gleich den üblichen quantenmechanischen Formeln (siehe Kap. 5.4) Soweit die Heuristik. Wir werden uns im nun folgenden Kapitel den Beweisen des „Scattering-into-Cones“-Satzes und des „Flux-across-Surfaces“-Satzes zuwenden

Kapitel 4

Streutheorie mit Trajektorien – Mathematische Resultate

4.1 Der „Scattering-into-Cones“-Satz

Wir wollen der Vollständigkeit halber mit dem „Flux-across-Surfaces“-Satz auch den „Scattering-into-Cones“-Satz besprechen und beginnen damit, weil sein Beweis fast trivial ist. Wir wählen eine etwas andere Formulierung als in DOLLARD [24]. Zunächst

Lemma 4.1 *Sei H ein selbstadjungierter Operator auf $L^2(\mathbb{R}^3)$ und $\psi_t := e^{-iHt}\psi$. Unter der Voraussetzung, daß es ein $\Phi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ gibt, so daß*

$$|\psi_t(\mathbf{x})|^2 = t^{-3}|\Phi(\frac{\mathbf{x}}{t})|^2 + N(\mathbf{x}, t), t > 0, \quad (4.1)$$

und falls

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int d^3x |N(\mathbf{x}, t)| = 0, \quad (4.2)$$

gilt für alle Kegel C

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_C d^3x |\psi_t(\mathbf{x})|^2 = \int_C d^3v |\Phi(\mathbf{v})|^2. \quad (4.3)$$

Beweis Das Ergebnis folgt sofort mit der Variablensubstitution $\mathbf{v} := \frac{\mathbf{x}}{t}$. ■

Satz 4.2 („Scattering-into-Cones“-Satz für den freien Fall)

Sei $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ und $\psi_t := e^{-iH_0 t}\psi$. Dann gilt für alle Kegel C

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_C d^3x |\psi_t(\mathbf{x})|^2 = \int_C d^3v |\hat{\psi}(\mathbf{v})|^2. \quad (4.4)$$

Beweis DOLLARDS Lemma 1 3 besagt, daß

$$\psi_t(\mathbf{x}) = (it)^{-3/2} e^{i\frac{x^2}{2t}} \hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) + \tilde{N}(\mathbf{x}, t) =: \phi(\mathbf{x}, t) + \tilde{N}(\mathbf{x}, t) \quad (4.5)$$

mit $\lim_{t \rightarrow \infty} \|\tilde{N}(\cdot, t)\|_2 = 0$. Also hat

$$|\psi_t(\mathbf{x})|^2 = t^{-3} |\hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right)|^2 + N(\mathbf{x}, t) =: t^{-3} |\Phi\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right)|^2 + N(\mathbf{x}, t) \quad (4.6)$$

mit $N := |\tilde{N}|^2 + 2\text{Re}\tilde{N}\phi(\mathbf{x}, t)$ die Form 4.1, denn

$$\int d^3x |\text{Re}\tilde{N}(\mathbf{x}, t)\phi(\mathbf{x}, t)| \leq \int d^3x |\tilde{N}(\mathbf{x}, t)\phi(\mathbf{x}, t)| \leq \|\tilde{N}(\cdot, t)\|_2 \|\phi(\cdot, t)\|_2, \quad (4.7)$$

d h. $\lim_{t \rightarrow \infty} \int d^3x |N(\mathbf{x}, t)| = 0$. Mit Lemma 4 1 folgt somit 4 4. ■

Satz 4.3 („Scattering-into-Cones“-Satz im wechselwirkenden Fall)

Sei H ein selbstadjungierter Operator auf $L^2(\mathbb{R}^3)$, so daß $U_+ := s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} e^{iH_0 t} e^{-iHt}$ auf $\mathcal{H}_{ac}(H)$ unitär ist. Sei $\psi \in \mathcal{H}_{ac}(H)$ und $\psi_t := e^{-iHt}\psi$. Dann gilt für alle Kegel C

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_C d^3x |\psi_t(\mathbf{x})|^2 = \int_C d^3v |\widehat{U_+}\psi(\mathbf{v})|^2 \quad (4.8)$$

Beweis Mit $\|P_C e^{-iHt}\psi\|_2^2 = \int_C d^3x |\psi_t(\mathbf{x})|^2$ und unter Beachtung von $\|P_C\|_{op} \leq 1$ ergibt sich aufgrund der Definition von U_+

$$\begin{aligned} | \|P_C e^{-iHt}\psi\|_2^2 - \|P_C e^{-iH_0 t} U_+ \psi\|_2^2 | &= (\|P_C e^{-iHt}\psi\|_2 + \|P_C e^{-iH_0 t} U_+ \psi\|_2) \\ &\times | \|P_C e^{-iHt}\psi\|_2 - \|P_C e^{-iH_0 t} U_+ \psi\|_2 | \\ &\leq 2\|\psi\|_2 \|e^{-iHt}\psi - e^{-iH_0 t} U_+ \psi\|_2 \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (4.9)$$

für $t \rightarrow \infty$. Also folgt die Aussage mit Satz 4.2, indem $\hat{\psi}$ durch $\widehat{U_+}\psi$ ersetzt wird ■

Bemerkung 4.4 Die Forderungen an U_+ sind für eine große Menge von Potentialen erfüllt. Falls allerdings V langreichweitig ist, d.h. $V(\mathbf{x}) = O(x^{-\epsilon})$, $\epsilon \leq 1$, existiert U_+ nicht (siehe [66] S 173, [24] und Kap. 5.1).

4.2 Der „Flux-across-Surfaces“-Satz

Der freie Fall

Satz 4.5 Sei $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ und $\psi_t = e^{-iH_0 t} \psi$. Dann gilt für alle $T \in \mathbb{R}$ und jeden Kegel C

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu d\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} |\mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu| d\sigma = \int_C d^3 v |\hat{\psi}(\mathbf{v})|^2. \quad (4.10)$$

Bemerkung 4.6 Die Bedingung $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ ist nur aus Bequemlichkeitsgründen eingeführt worden, und der Beweis kann unter viel schwächeren Bedingungen geführt werden (siehe Bemerkung 4.9).

Wir beweisen den Satz in zwei Schritten. Zunächst nehmen wir $T > 0$ an und kümmern uns im zweiten Schritt um den allgemeinen Fall $T \in \mathbb{R}$.

Wir beginnen mit einem fundamentalen Lemma, in dem der „asymptotisch freie“ Teil der allgemeinen Bewegung der Wellenfunktion separiert wird.

Lemma 4.7 Sei H ein selbstadjungierter Operator auf $L^2(\mathbb{R}^3)$. Sei $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$, und für $t \geq 0$ sei $\psi_t := e^{-iHt} \psi$. Es existiere ein $\Phi \in L^2(\mathbb{R}^3)$, ein $N : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$ und ein $T > 0$, so daß

$$i) \mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}}{t} t^{-3} |\Phi(\frac{\mathbf{x}}{t})|^2 + N(\mathbf{x}, t) \quad (4.11)$$

punktweise für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, t > 0$, und

$$ii) \lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^\infty dt \int_{\partial K_R} |N(\mathbf{x}, t) \cdot \nu d\sigma| = 0. \quad (4.12)$$

Dann gilt für alle Kegel $C \subset \mathbb{R}^3$

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu(\mathbf{x}) d\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} |\mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu(\mathbf{x})| d\sigma = \int_C d^3 v |\Phi(\mathbf{v})|^2. \quad (4.13)$$

Beweis Mit 4.11 gilt

$$\begin{aligned} \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu(\mathbf{x}) d\sigma &= \int_T^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} t^{-3} |\Phi(\frac{\mathbf{x}}{t})|^2 \frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \nu(\mathbf{x}) d\sigma \\ &+ \int_T^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} N(\mathbf{x}, t) \cdot \nu(\mathbf{x}) d\sigma \\ &= \int_T^\infty dt \int_C d\Omega R^2 t^{-3} |\Phi(\frac{\mathbf{x}(R, \theta, \phi)}{t})|^2 \frac{\mathbf{x}(R, \theta, \phi)}{t} \cdot \nu(\theta, \phi) \\ &+ \int_T^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} N(\mathbf{x}, t) \cdot \nu(\mathbf{x}) d\sigma, \end{aligned} \quad (4.14)$$

wobei wir Polarkoordinaten $\mathbf{x}(r, \theta, \phi) = (r \sin \theta \cos \phi, r \sin \theta \sin \phi, r \cos \theta)$ benutzen. Wegen $\frac{\mathbf{x}(R, \theta, \phi)}{t} = \mathbf{x}(\frac{R}{t}, \theta, \phi)$ und mit der Variablensubstitution $v = \frac{R}{t}$ ergibt sich also

$$\int_T^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu(\mathbf{x}) d\sigma = \int_0^{R/T} dv v^2 \int_C d\Omega |\Phi(v, \theta, \phi)|^2 + \int_T^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} N(\mathbf{x}, t) \cdot \nu(\mathbf{x}) d\sigma \quad (4.15)$$

und daher mit 4.12

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu(\mathbf{x}) d\sigma = \int_0^\infty dv v^2 \int_C d\Omega |\Phi(v, \theta, \phi)|^2 = \int_C d^3 v |\Phi(\mathbf{v})|^2 \quad (4.16)$$

■

Man sieht direkt (oder mit Lemma 2.3 und $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3) \subset C^\infty(H_0)$, was sofort aus der Definition dieser Mengen folgt), daß alle in Satz 4.5 vorkommenden Ausdrücke punktweise definiert sind.

Beweis des „Flux-across-Surfaces“-Satzes 4.5, erster Schritt

Wir verifizieren die Bedingungen von Lemma 4.7 für ein festes $T > 0$. Nach 1.2 gilt für $t > 0$ die Aufspaltung

$$\begin{aligned} \psi_t(\mathbf{x}) &= (e^{-iH_0 t} \psi)(\mathbf{x}) \\ &= \int d^3 y \frac{e^{i\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{2t}}}{(2\pi i t)^{3/2}} \psi(\mathbf{y}) \\ &= \frac{e^{i\frac{\mathbf{x}^2}{2t}}}{(i t)^{3/2}} \hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) + \frac{e^{i\frac{\mathbf{x}^2}{2t}}}{(i t)^{3/2}} \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}}{t}} (e^{i\frac{\mathbf{y}^2}{2t}} - 1) \psi(\mathbf{y}). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Wegen

$$|e^{i\frac{\mathbf{y}^2}{2t}} - 1| \leq 2 \quad (4.18)$$

für alle $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3, t > 0$, und der Voraussetzung $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ ist

$$f(\mathbf{v}, t) = \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{v} \cdot \mathbf{y}} (e^{i\frac{\mathbf{y}^2}{2t}} - 1) \psi(\mathbf{y}) \quad (4.19)$$

für alle $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3$ punktweise definiert. f ist für $t > 0$ differenzierbar, denn wegen $y\psi(\mathbf{y}) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ und 4.18 sind Differentiation und Integration vertauschbar. Wir setzen für $t > 0$

$$\mathbf{g}(\mathbf{v}, t) := \nabla f(\mathbf{v}, t) = -i \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{v} \cdot \mathbf{y}} (e^{i\frac{\mathbf{y}^2}{2t}} - 1) \mathbf{y} \psi(\mathbf{y}) \quad (4.20)$$

Weiter seien für $t > 0$

$$\alpha(\mathbf{x}, t) := \frac{e^{i\frac{\mathbf{x}^2}{2t}}}{(i t)^{3/2}} \hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) \quad (4.21)$$

und

$$\beta(\mathbf{x}, t) := \frac{e^{i\frac{\mathbf{x}^2}{2t}}}{(it)^{3/2}} f\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right), \quad (4.22)$$

d h. $\psi_t(\mathbf{x}) = \alpha(\mathbf{x}, t) + \beta(\mathbf{x}, t)$. Nun ist

$$\nabla\alpha(\mathbf{x}, t) = \frac{e^{i\frac{\mathbf{x}^2}{2t}}}{(it)^{3/2}} \left(i\frac{\mathbf{x}}{t}\hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) + \frac{1}{t}(\nabla\hat{\psi})\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) \right) \quad (4.23)$$

und

$$\nabla\beta(\mathbf{x}, t) = \frac{e^{i\frac{\mathbf{x}^2}{2t}}}{(it)^{3/2}} \left(i\frac{\mathbf{x}}{t}f\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) + \frac{1}{t}\mathbf{g}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \right). \quad (4.24)$$

Damit ist der Strom

$$\begin{aligned} \mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) &= \text{Im}(\psi_t^*(\mathbf{x})\nabla\psi_t(\mathbf{x})) \\ &= \text{Im}(\alpha^*(\mathbf{x}, t)\nabla\alpha(\mathbf{x}, t) + \beta^*(\mathbf{x}, t)\nabla\alpha(\mathbf{x}, t) + \alpha^*(\mathbf{x}, t)\nabla\beta(\mathbf{x}, t) + \beta^*(\mathbf{x}, t)\nabla\beta(\mathbf{x}, t)) \\ &= \frac{\mathbf{x}}{t}t^{-3}|\hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right)|^2 + N(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (4.25)$$

wobei wir

$$N(\mathbf{x}, t) := \text{Im} \left(t^{-4}\hat{\psi}^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right)\nabla\hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) + \beta^*(\mathbf{x}, t)\nabla\alpha(\mathbf{x}, t) + \alpha^*(\mathbf{x}, t)\nabla\beta(\mathbf{x}, t) + \beta^*(\mathbf{x}, t)\nabla\beta(\mathbf{x}, t) \right) \quad (4.26)$$

gesetzt haben. Also haben wir 4.11 mit $\Phi := \psi$, und für 4.12 müssen wir nur noch zeigen, daß für alle $T > 0$

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^\infty dt \int_{\partial K_R} |N(\mathbf{x}, t) \cdot \nu| d\sigma = 0 \quad (4.27)$$

ist. Dazu benutzen wir die folgenden Beobachtungen:

$$\sup_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3, R > 0} \left| f\left(\mathbf{v}, \frac{R}{v}\right) \right| \leq 2(2\pi)^{-3/2} \|\psi\|_1 =: c_f, \quad (4.28)$$

$$\sup_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3, R > 0} \left| g\left(\mathbf{v}, \frac{R}{v}\right) \right| \leq 2(2\pi)^{-3/2} \|y\psi(\mathbf{y})\|_1 =: c_g. \quad (4.29)$$

Weiter ist für alle $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^3$

$$\lim_{R \rightarrow \infty} f\left(\mathbf{v}, \frac{R}{v}\right) = 0. \quad (4.30)$$

4.28 und 4.29 folgen aus $|e^{i\frac{\mathbf{y}^2 v}{2R}} - 1| \leq 2$ für alle $\mathbf{v}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^3, R > 0$. Da insbesondere $\psi \in L_1(\mathbb{R}^3)$ und $\lim_{R \rightarrow \infty} |e^{i\frac{\mathbf{y}^2 v}{2R}} - 1| = 0$ für alle $\mathbf{v}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$, folgt 4.30 mit dem Satz der dominierten Konvergenz.

Nun zu 4.27. Wir behandeln die Terme auf der rechten Seite von 4.26 einzeln. Für den ersten Term bekommen wir mit $|\text{Im}z| \leq |z|$, der Substitution $v = \frac{R}{t}$ und der

$$\begin{aligned}
 \left| \int_T^\infty dt \int_{\partial K_R} t^{-4} \hat{\psi}^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) \nabla \hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) d\sigma \right| &\leq \int_T^\infty dt \int_{(4\pi)} d\Omega R^2 t^{-4} |\hat{\psi}^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right)| |\nabla \hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right)| \\
 &\leq \int_0^\infty dv v^2 \int_{(4\pi)} d\Omega R^{-1} |\hat{\psi}^*(\mathbf{v})| |\nabla \hat{\psi}(\mathbf{v})| \\
 &\leq R^{-1} \|\hat{\psi}^*\|_2 \|\nabla \hat{\psi}\|_2 \rightarrow 0
 \end{aligned} \tag{4.31}$$

für $R \rightarrow \infty$.

Für den zweiten Term

$$\beta^* \nabla \alpha = t^{-3} f^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \left(i \frac{\mathbf{x}}{t} \hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) + \frac{1}{t} (\nabla \hat{\psi})\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) \right) \tag{4.32}$$

bekommen wir, ähnlich wie vorher, für $R > 0$ und 4.28

$$\begin{aligned}
 \left| \int_T^\infty dt \int_{\partial K_R} \beta^* \nabla \alpha \cdot \nu d\sigma \right| &\leq \int_T^\infty dt \int_{(4\pi)} d\Omega R^2 t^{-3} |f^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right)| \left| \frac{R}{t} \hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) + \frac{1}{t} (\nabla \hat{\psi})\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) \right| \\
 &\leq \int_0^\infty dv \int_{(4\pi)} d\Omega v^2 |f^*\left(\mathbf{v}, \frac{R}{v}\right)| |\hat{\psi}(\mathbf{v}) + \frac{1}{R} (\nabla \hat{\psi})(\mathbf{v})| \\
 &\leq \int_0^\infty dv \int_{(4\pi)} d\Omega v^2 |f^*\left(\mathbf{v}, \frac{R}{v}\right)| |\hat{\psi}(\mathbf{v})| + \frac{1}{R} c_f \|(\nabla \hat{\psi})(\mathbf{v})\|_1.
 \end{aligned}$$

Der zweite Term strebt mit $R \rightarrow \infty$ gegen Null, und der erste Term konvergiert ebenfalls gegen Null. Unter Beachtung von 4.28 und $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$, also insbesondere $\hat{\psi} \in L^1(\mathbb{R}^3)$, und dann 4.30 mit dem Satz von der dominierten Konvergenz.

Für den Term

$$\alpha^* \nabla \beta = t^{-3} \hat{\psi}^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) \left(i \frac{\mathbf{x}}{t} f\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) + \frac{1}{t} g\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \right) \tag{4.33}$$

gilt Analoges, denn

$$\begin{aligned}
 \left| \int_T^\infty dt \int_{\partial K_R} \alpha^* \nabla \beta d\sigma \right| &\leq \int_T^\infty dt \int_{(4\pi)} d\Omega R^2 t^{-3} |\hat{\psi}^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right)| \left(\left| \frac{\mathbf{x}}{t} f\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \right| + \frac{1}{t} |g\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right)| \right) \\
 &\leq \int_0^\infty dv \int_{(4\pi)} d\Omega v^2 |\hat{\psi}^*(\mathbf{v})| \left(|f\left(\mathbf{v}, \frac{R}{v}\right)| + \frac{1}{R} |g\left(\mathbf{v}, \frac{R}{v}\right)| \right) \\
 &\leq \int_0^\infty dv \int_{(4\pi)} d\Omega v^2 |\hat{\psi}^*(\mathbf{v})| |f\left(\mathbf{v}, \frac{R}{v}\right)| + c_g \frac{1}{R} \|\hat{\psi}\|_1,
 \end{aligned} \tag{4.34}$$

so daß wir wie oben schließen können

Nun muß nur noch gezeigt werden, daß für alle $T > 0$

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^\infty dt \int_{\partial K_R} |\beta^* \nabla \beta \cdot \nu| d\sigma = 0 \tag{4.35}$$

gilt.

$$\begin{aligned}
\beta^* \nabla \beta &= it^{-3} f^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \mathbf{y}} (e^{i\frac{y^2}{2t}} - 1) \left(\frac{\mathbf{x}}{t} - \frac{\mathbf{y}}{t}\right) \psi(\mathbf{y}) \\
&= -it^{-3} f^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \mathbf{y}} \left(\frac{\mathbf{x}}{t} - \frac{\mathbf{y}}{t}\right) \psi(\mathbf{y}) \\
&+ it^{-3} f^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \mathbf{y}} e^{i\frac{y^2}{2t}} \left(\frac{\mathbf{x}}{t} - \frac{\mathbf{y}}{t}\right) \psi(\mathbf{y}) \\
&= t^{-3} f^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} (\nabla_{\mathbf{y}} e^{-i\frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \mathbf{y}}) \psi(\mathbf{y}) \\
&+ it^{-4} f^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \mathbf{y}} \mathbf{y} \psi(\mathbf{y}) \\
&- t^{-3} f^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} \nabla_{\mathbf{y}} (e^{-i\frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \mathbf{y}} e^{i\frac{y^2}{2t}}) \psi(\mathbf{y})
\end{aligned}$$

Der Term 4.38 kann wie 4.32 behandelt werden und liefert keinen Beitrag. Integration von 4.37 + 4.39 liefert

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}(\mathbf{x}, t) &:= t^{-3} f^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} (e^{-i\frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \mathbf{y}} e^{i\frac{y^2}{2t}} \nabla_{\mathbf{y}} \psi(\mathbf{y}) - e^{-i\frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \mathbf{y}} \nabla_{\mathbf{y}} \psi(\mathbf{y})) \\
&= t^{-3} f^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \mathbf{y}} (e^{i\frac{y^2}{2t}} - 1) \nabla_{\mathbf{y}} \psi(\mathbf{y}) \\
&= -t^{-3} f^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} \frac{t^2}{x^2} (\nabla_{\mathbf{y}}^2 e^{-i\frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \mathbf{y}}) (e^{i\frac{y^2}{2t}} - 1) \nabla_{\mathbf{y}} \psi(\mathbf{y}) \\
&= -t^{-1} x^{-2} f^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right) \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \mathbf{y}} \nabla_{\mathbf{y}}^2 ((e^{i\frac{y^2}{2t}} - 1) \nabla_{\mathbf{y}} \psi(\mathbf{y})),
\end{aligned}$$

wobei wir zuletzt noch zweimal partiell integriert haben. Nun ist

$$\begin{aligned}
\nabla_{\mathbf{y}} (e^{i\frac{y^2}{2t}} - 1) &= it^{-1} \mathbf{y} e^{i\frac{y^2}{2t}}, \\
\nabla_{\mathbf{y}}^2 (e^{i\frac{y^2}{2t}} - 1) &= \left(-\frac{y^2}{t^2} + 3it^{-1}\right) e^{i\frac{y^2}{2t}}
\end{aligned}$$

und

$$|e^{i\frac{y^2}{2t}} - 1| \leq \frac{y^2}{2t},$$

so daß wegen $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$

$$|\nabla_{\mathbf{y}}^2 ((e^{i\frac{y^2}{2t}} - 1) \nabla_{\mathbf{y}} \psi(\mathbf{y}))| \leq h(\mathbf{y}) O(t^{-1})$$

für ein $h \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$. Also ist

$$\left| \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\frac{\mathbf{x}}{t} \cdot \mathbf{y}} (\nabla_{\mathbf{y}}^2 ((e^{i\frac{y^2}{2t}} - 1) \nabla_{\mathbf{y}} \psi(\mathbf{y}))) \right| \leq O(t^{-1}) \int \frac{d^3 y}{(2\pi)^{3/2}} h(\mathbf{y}) = cO(t^{-1}).$$

Damit erhalten wir

$$|\mathbf{a}(\mathbf{x}, t)| \leq cO(t^{-2})x^{-2}|f^*\left(\frac{\mathbf{x}}{t}, t\right)|, \quad (4.45)$$

und mit $\mathbf{R}(\theta, \phi) := \mathbf{x}(R, \theta, \phi)$ ergibt sich

$$\int_T^\infty dt \int_{\partial K_R} |\mathbf{a} \cdot \nu| d\sigma \leq c \int_T^\infty dt \int_{(4\pi)} d\Omega O(t^{-2}) |f^*\left(\frac{\mathbf{R}}{t}, t\right)|. \quad (4.46)$$

Nun ist einerseits (vgl. 4.28)

$$\sup_{t \geq T, R > 0} |f^*\left(\frac{\mathbf{R}}{t}, t\right)| \leq c_f, \quad (4.47)$$

und andererseits ist wegen des Lemmas von RIEMANN-LEBESGUE

$$\lim_{R \rightarrow \infty} |f^*\left(\frac{\mathbf{R}}{t}, t\right)| = 0 \quad \forall t > 0. \quad (4.48)$$

Also geht die rechte Seite von 4.46 aufgrund des Satzes von der dominierten Konvergenz im Limes $R \rightarrow \infty$ gegen Null. Damit ist der erste Schritt des Beweises beendet.

Wir müssen im zweiten Schritt nur noch zeigen, daß

Lemma 4.8 Für alle $-\infty < T_1 < T_2 < \infty$ ist

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{T_1}^{T_2} dt \int_{\partial K_R} |\mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu| d\sigma = 0. \quad (4.49)$$

gilt.

Beweis Zunächst ist

$$\int_{T_1}^{T_2} dt \int_{\partial K_R} |\mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu| d\sigma \leq 4\pi \int_{T_1}^{T_2} dt R^2 \sup_{\mathbf{x} \in \partial K_R} |\psi_t(\mathbf{x})| |\nabla \psi_t(\mathbf{x})|. \quad (4.50)$$

Wir wollen den Satz der dominierten Konvergenz anwenden. Da nach 1.2

$$\psi_t(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3 k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \hat{\psi}(\mathbf{k}), \quad (4.51)$$

und damit

$$\nabla \psi_t(\mathbf{x}) = i(2\pi)^{-3/2} \int d^3 k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \mathbf{k} \hat{\psi}(\mathbf{k}), \quad (4.52)$$

ist offenbar

$$\sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, t \in \mathbb{R}} |\nabla \psi_t(\mathbf{x})| \leq (2\pi)^{-3/2} \|k \hat{\psi}(\mathbf{k})\|_1. \quad (4.53)$$

Da $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ können wir in 4.51 n -fach partiell integrieren, und wir erhalten

$$\begin{aligned} \psi_t(\mathbf{x}) &= (2\pi)^{-3/2} x^{-n} \int d^3 k \left[\left(\frac{1}{i}\nabla_{\mathbf{k}}\right)^n e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \right] e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \hat{\psi}(\mathbf{k}) \\ &= (2\pi)^{-3/2} x^{-n} \int d^3 k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \left[\left(\frac{1}{i}\nabla_{\mathbf{k}}\right)^n e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \hat{\psi}(\mathbf{k}) \right]. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Wegen $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ ist

$$\left| \left(\frac{1}{i} \nabla_k \right)^n e^{-i \frac{k^2 t}{2}} \hat{\psi}(\mathbf{k}) \right| \leq h(\mathbf{y}) O(t^n) \quad (4.55)$$

für ein $h \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$. Für $n = 2$ gilt damit

$$\begin{aligned} R^2 \sup_{\mathbf{x} \in \partial K_R} |\psi_t(\mathbf{x})| |\nabla \psi_t(\mathbf{x})| &\leq (2\pi)^{-3/2} \|k \hat{\psi}(\mathbf{k})\|_1 \int d^3 k \left| \left(\frac{1}{i} \nabla_k \right)^2 e^{-i \frac{k^2 t}{2}} \hat{\psi}(\mathbf{k}) \right| \\ &\leq c O(t^2) \in L^1(T_1, T_2) \end{aligned} \quad (4.56)$$

Mit $n = 3$ ergibt sich, wegen $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$, für jedes feste $t \in [T_1, T_2]$

$$\begin{aligned} R^2 \sup_{\mathbf{x} \in \partial K_R} |\psi_t(\mathbf{x})| |\nabla \psi_t(\mathbf{x})| &\leq (2\pi)^{-3/2} R^{-1} \|k \hat{\psi}(\mathbf{k})\|_1 \int d^3 k \left| \left(\frac{1}{i} \nabla_k \right)^3 e^{-i \frac{k^2 t}{2}} \hat{\psi}(\mathbf{k}) \right| \\ &\leq c R^{-1} O(t^3) \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (4.57)$$

für $R \rightarrow \infty$. Damit ist der Satz von der dominierten Konvergenz in 4.50 anwendbar. ■

Bemerkung 4.9 HUNZIKER [46] zeigt, daß für beschränkte C^∞ -Potentiale der Raum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ unter der Zeitentwicklung e^{-iHt} invariant ist. Damit ist insbesondere die Bedingung an die Anfangswellenfunktion im Satz 4.5 zeitinvariant. Man entnimmt dem Beweis von Satz 4.5, daß viel schwächere Bedingungen an ψ genügen dürften, um den Beweis zu führen.

Bemerkung 4.10 Man entnimmt dem Beweis, daß die Aussage von Satz 4.5 auch gilt, falls $T : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ mit $\lim_{R \rightarrow \infty} T(R)/R = 0$. Für den speziellen Fall $C = \mathbb{R}^3$ ergibt sich für $T(R)$ mit $\lim_{R \rightarrow \infty} T(R)/R = 0$, daß

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{T(R)}^{\infty} dt \int_{\partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu(\mathbf{x}) d\sigma = 1. \quad (4.58)$$

Anwendung des GAUSSschen Satzes und der Äquivarianz liefert in diesem Fall die zusätzliche Information

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \mathbb{P}^{\psi}(\mathbf{x}(T(R)) \in K_R) = 1. \quad (4.59)$$

Für den physikalisch entscheidenden Fall, bei dem man ψ zur Zeit $t = 0$ präpariert, genügt die Aussage von Satz 4.5 mit $T = 0$.

Der Potentialfall

Wir kommen nun zum „Flux-across-Surfaces“-Satz für den Potentialfall. Zunächst formulieren wir Bedingungen für die Eigenfunktionsentwicklung von $H = H_0 + V$.

Definition 4.11 Ein Potential $V : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ heie „asymptotisches FOURIER-Potential“, falls folgende Bedingungen erfüllt sind:

1. $H := H_0 + V$ ist selbstadjungiert mit $\mathcal{D}(H) = \mathcal{D}(H_0)$.
2. Es gibt keine positiven Eigenwerte von H , und das Spektrum auf der positiven Halbachse ist rein absolut stetig.
3. Die Wellenoperatoren $U_{\pm} := s\text{-}\lim e^{iH_0 t} e^{-iH t}$ existieren mit $\text{ran} U_+ = \text{ran} U_- = \mathcal{H}_{ac}(H)$ und sind unitär auf \mathcal{H}_{ac} .
4. Es gibt für jedes $k > 0$ eine eindeutige Funktion $\eta(\mathbf{x}, \mathbf{k})$, so daß $\phi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) := e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + \eta(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ Lösung der LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung

$$\phi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} - \frac{1}{2\pi} \int d^3 y \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot |\mathbf{x} - \mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} V(\mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}, \mathbf{k}), \quad (4.60)$$

und der stationären SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\left(\frac{\Delta}{2} - V(\mathbf{x}) + \frac{k^2}{2} \right) \phi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = 0 \quad (4.61)$$

ist.

5. Es gilt

$$\phi \in C^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}) \quad (4.62)$$

und

$$c_\phi := \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \mathbf{k} \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}} |\phi(\mathbf{x}, \mathbf{k})| < \infty. \quad (4.63)$$

6. Für $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ existiert

$$\psi^\#(\mathbf{k}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3 x \phi^*(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \psi(\mathbf{x}) \quad (4.64)$$

mit (P_{ac} bezeichnet die Projektion auf \mathcal{H}_{ac})

$$\int |\psi^\#(\mathbf{k})|^2 d^3 k = \|P_{ac}(H)\psi\|^2. \quad (4.65)$$

7. Für $\psi \in \mathcal{H}_{ac}$ gilt

$$(e^{-iHt}\psi)(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3 k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \psi^\#(\mathbf{k}) \phi(\mathbf{x}, \mathbf{k}). \quad (4.66)$$

8. Für jedes $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ gilt

$$(\widehat{U_+ \psi})(\mathbf{k}) = \psi^\#(\mathbf{k}). \quad (4.67)$$

Bemerkung 4.12 Asymptotische FOURIER-Potentiale sind „fast“ IKEBE-Potentiale: In IKEBE [47] und Satz XI.41 und XI 70 in REED-SIMON [66] sowie Satz V 7 aus [72] wird gezeigt, daß für reellwertiges $V \in L^2(\mathbb{R}^3)$, $|V(\mathbf{x})| = O(x^{-2-h})$ für ein $h > 0$, das, außer an endlich vielen Singularitäten, lokal HÖLDER-stetig ist („IKEBE-Potential“), alle Bedingungen von 4 11 bis auf 3) erfüllt sind. An Stelle von 3) tritt: ϕ und η sind beschränkt und gleichmäßig stetig für $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ und $\mathbf{k} \in D \subset \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ kompakt. Es ist nun wohlbekannt, daß für $V \in C^\infty(\mathbb{R}^3)$ auch die Lösungen der stationären SCHRÖDINGER-Gleichung $\phi(\cdot, \mathbf{k}) \in C^\infty(\mathbb{R}^3)$ für jedes $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$ sind (siehe [65] II, Satz IX 62). Es bleibt also zu zeigen, daß für jedes $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ sowohl $\phi(\mathbf{x}, \cdot) \in C^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ als auch $\sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \mathbf{k} \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}} |\phi(\mathbf{x}, \mathbf{k})| < \infty$ ist. Dies dürfte für genügend glatte und hinreichend schnell abfallende Potentiale relativ einfach zu zeigen sein. Wir gehen aber in dieser Arbeit darauf nicht weiter ein.

Wir führen noch eine Bezeichnung für Wellenfunktionen ein, die sich asymptotisch „regulär“ verhalten:

Definition 4.13 Eine Wellenfunktion $\psi \in C^\infty(H)$ heie „reguläre Streuwelle“ zum Potential V , falls die Aussage von Satz 4.5 mit ψ ersetzt durch $U_+\psi$ und $T = 0$ gilt, d.h. falls für $\phi_t := e^{-iH_0 t} U_+ \psi$

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\phi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu d\sigma = \int_C d^3 k |\widehat{U_+ \psi}(\mathbf{k})|^2 \quad (4.68)$$

für alle Kegel C gilt.

Damit können wir nun folgenden Satz beweisen:

Satz 4.14 Sei $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ asymptotisches FOURIER-Potential, und sei ψ reguläre Streuwelle zum Potential V mit $\widehat{U_+ \psi} \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Dann gilt für alle Kegel C

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu d\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} |\mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) \cdot \nu| d\sigma = \int_C d^3 k |\widehat{U_+ \psi}(\mathbf{k})|^2. \quad (4.69)$$

Bemerkung 4.15 $\psi(\mathbf{x}) := (2\pi)^{-3/2} \int d^3 k \phi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \hat{g}(\mathbf{k})$ mit $\hat{g} \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ hat die im Satz geforderten Eigenschaften.

Wir beweisen den Satz in zwei Schritten. Im ersten Schritt werden wir $U_+\psi$ mit $\widehat{U_+ \psi} \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$ annehmen. Letzteres ist die übliche Annahme der Streutheorie (siehe etwa [27]), und dafür gelten dann die Aussagen für IKEBE-Potentiale (modulo Differenzierbarkeit in k). Im zweiten Schritt kümmern wir uns dann um die kleinen k -Werte

Beweis Sei zunächst $\widehat{U_+}\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$. Nach 4.66 und 4.67 ist

$$\psi_t(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \widehat{U_+}\psi(\mathbf{k}) \phi(\mathbf{x}, \mathbf{k}), \quad (4.70)$$

und nach den Voraussetzungen an $\widehat{U_+}\psi(\mathbf{k})$ und $\phi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ ist ψ_t differenzierbar. Der Beweis des Satzes stützt sich auf

Lemma 4.16

$$\beta(\mathbf{x}, t) := (2\pi)^{-3/2} \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \widehat{U_+}\psi(\mathbf{k}) (\phi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}) \quad (4.71)$$

erfülle folgende Bedingungen:

$$i) \quad \forall t > 0 : \lim_{R \rightarrow \infty} R^2 \sup_{\mathbf{x} \in \partial K_R} |\beta(\mathbf{x}, t)| = 0 \quad (4.72)$$

$$\forall t > 0 : \lim_{R \rightarrow \infty} R^2 \sup_{\mathbf{x} \in \partial K_R} |\nabla \beta(\mathbf{x}, t)| = 0 \quad (4.73)$$

$$ii) \quad \sup_{R \geq R_0} R^2 \sup_{\mathbf{x} \in \partial K_R} |\beta(\mathbf{x}, t)| = O(t^{-1-\epsilon}) \quad (4.74)$$

$$\sup_{R \geq R_0} R^2 \sup_{\mathbf{x} \in \partial K_R} |\nabla \beta(\mathbf{x}, t)| = O(t^{-1-\epsilon}) \quad (4.75)$$

für ein $R_0 < \infty$. Dann gilt

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma = \int_C d^3k |\widehat{U_+}\psi(\mathbf{k})|^2. \quad (4.76)$$

Beweis Wir verifizieren die Bedingungen von Lemma 4.7. Sei $\eta(\mathbf{x}, \mathbf{k}) := \phi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$ und $\hat{g} := \widehat{U_+}\psi$. Dann ist

$$\begin{aligned} \psi_t(\mathbf{x}) &= (2\pi)^{-3/2} \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \hat{g}(\mathbf{k}) \phi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \\ &= (2\pi)^{-3/2} \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \hat{g}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + (2\pi)^{-3/2} \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \hat{g}(\mathbf{k}) \eta(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \\ &=: \alpha(\mathbf{x}, t) + \beta(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (4.77)$$

Nach 1.2 ist $\alpha(\mathbf{x}, t) = (e^{-iH_0 t} g)(\mathbf{x})$. Wie im Beweis des Satzes 4.5 ergibt sich für $t > 0$

$$\mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}}{t} t^{-3} |\hat{g}(\frac{\mathbf{x}}{t})|^2 + N(\mathbf{x}, t) \quad (4.78)$$

mit

$$N(\mathbf{x}, t) = \text{Im } N_1(\mathbf{x}, t) + \alpha^*(\mathbf{x}, t) \nabla \beta(\mathbf{x}, t) + \beta^*(\mathbf{x}, t) \nabla \alpha(\mathbf{x}, t) + \beta^*(\mathbf{x}, t) \nabla \beta(\mathbf{x}, t). \quad (4.79)$$

4.69 folgt nun nach Lemma 4.7, sobald

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{\partial K_R} |N(\mathbf{x}, t) \cdot \nu| d\sigma = 0 \quad (4.80)$$

gilt. Wir zeigen, daß die einzelnen Terme Null werden, wobei der erste Term $N_1(\mathbf{x}, t)$ nach Voraussetzung an ψ als reguläre Streuwelle nicht beiträgt.

Nun ist $\alpha(\mathbf{x}, t) = (e^{-iH_0 t} g)(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3 k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \hat{g}(\mathbf{k})$, und wegen $\hat{g} \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ gibt es ein $c < \infty$, so daß

$$\sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, t \in \mathbb{R}} |\alpha(\mathbf{x}, t)| \leq (2\pi)^{-3/2} \|\hat{g}\|_1 \leq c \quad (4.81)$$

und

$$\sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, t \in \mathbb{R}} |\nabla \alpha(\mathbf{x}, t)| \leq (2\pi)^{-3/2} \|k \hat{g}(\mathbf{k})\|_1 \leq c \quad (4.82)$$

Nun ist

$$\begin{aligned} \int_{\partial K_R} |\alpha^* \nabla \beta \cdot \nu| d\sigma &\leq \int_{\partial K_R} |\alpha| |\nabla \beta| d\sigma \\ &< 4\pi c R^2 \sup_{\mathbf{x} \in \partial K_R} |\nabla \beta(\mathbf{x}, t)| \end{aligned} \quad (4.83)$$

und auch

$$\int_{\partial K_R} |\beta^* \nabla \alpha \cdot \nu| d\sigma \leq 4\pi c R^2 \sup_{\mathbf{x} \in \partial K_R} |\beta(\mathbf{x}, t)| \quad (4.84)$$

$$\int_{\partial K_R} |\beta^* \nabla \beta \cdot \nu| d\sigma \leq 4\pi c R^{-2} (R^2 \sup_{\mathbf{x} \in \partial K_R} |\beta(\mathbf{x}, t)|) (R^2 \sup_{\mathbf{x} \in \partial K_R} |\nabla \beta(\mathbf{x}, t)|). \quad (4.85)$$

Nach Voraussetzung *i*) konvergieren alle drei Terme 4.83, 4.84 und 4.85 für $R \rightarrow \infty$ gegen Null und sind nach *ii*) gleichmäßig für $R \geq R_0$ durch eine integrierbare Funktion beschränkt. Mit dem Satz der dominierten Konvergenz folgt 4.80 und damit auch Lemma 4.16. ■

Nun zum Beweis des Satzes: Wir verifizieren nun die Bedingungen von Lemma 4.16 und verwenden dabei die Bezeichnung $\eta(\mathbf{k}, \mathbf{x}) := \phi(\mathbf{x}, \mathbf{k}) - e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$, so daß

$$\beta(\mathbf{x}, t) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3 k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k}) \eta(\mathbf{x}, \mathbf{k}). \quad (4.86)$$

Für $k > 0$ ist nun nach 4.60

$$\eta(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = -\frac{1}{2\pi} \int d^3 y \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} V(\mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}, \mathbf{k}), \quad (4.87)$$

so daß

$$\beta(\mathbf{x}, t) = (2\pi)^{-5/2} \int d^3 k \left(\int d^3 y \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} V(\mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}, \mathbf{k}) \right) e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k}). \quad (4.88)$$

Da V als asymptotisches FOURIER-Potential vorausgesetzt ist und $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ also insbesondere $V \in L^1(\mathbb{R}^3) \cap L^2(\mathbb{R}^3)$, folgt mit 4.63

$$\begin{aligned} \sup_{\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}} \left| \int d^3 y \frac{e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} V(\mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}, \mathbf{k}) \right| &\leq c_\phi \int d^3 y \frac{|V(\mathbf{y})|}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \\ &= c_\phi \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{y}| > 1} d^3 y \frac{|V(\mathbf{y})|}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} + c_\phi \int_{|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \leq 1} d^3 y \frac{|V(\mathbf{y})|}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \\ &\leq c_\phi \|V\|_1 + c_1 \|V\|_2 \leq c \end{aligned} \quad (4.89)$$

für ein $c < \infty$. Mit dem Satz von FUBINI können wir daher in 4.88 die Integrationen vertauschen und erhalten

$$|\beta(\mathbf{x}, t)| \leq (2\pi)^{-5/2} \int d^3y \frac{|V(\mathbf{y})|}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \left| \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} e^{-ik|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \phi(\mathbf{y}, \mathbf{k}) \widehat{U_+ \psi}(\mathbf{k}) \right|. \quad (4.90)$$

Für $\nabla\beta$ ergibt sich, unter Beachtung von $\int d^3y \frac{|V(\mathbf{y})|}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} < \infty$ (wie in 4.89) und

$$\nabla \frac{e^{-ik|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} = \left(\frac{-ik(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} - \frac{\mathbf{x} - \mathbf{y}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} \right) e^{-ik|\mathbf{x} - \mathbf{y}|}, \quad (4.91)$$

$$\begin{aligned} |\nabla\beta(\mathbf{x}, t)| &\leq (2\pi)^{-5/2} \int d^3y \frac{|V(\mathbf{y})|}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \left| \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} e^{-ik|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \phi(\mathbf{y}, \mathbf{k}) k \widehat{U_+ \psi}(\mathbf{k}) \right| \\ &+ (2\pi)^{-5/2} \int d^3y \frac{|V(\mathbf{y})|}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} \left| \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} e^{-ik|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \phi(\mathbf{y}, \mathbf{k}) \widehat{U_+ \psi}(\mathbf{k}) \right|. \end{aligned} \quad (4.92)$$

Da $k\widehat{U_+ \psi}(\mathbf{k}) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ den gleichen Träger wie $\widehat{U_+ \psi}$ hat, genügt es, den Term

$$h(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) := \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} e^{-ik|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \lambda(\mathbf{y}, \mathbf{k}) \quad (4.93)$$

mit $\lambda(\mathbf{y}, \mathbf{k}), \lambda(\mathbf{y}, \cdot) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}), \lambda(\cdot, \mathbf{k}) \in C_0^\infty(K_r)$ zu untersuchen, von dem wir zeigen wollen, daß er schnell in x und t abfällt. Der Satz zur „stationären Phase“ (aus [62] Satz 3.2., vgl. auch HÖRMANDER [45]) hilft uns dabei.

Satz 4.17 Sei $K \subset \mathbb{R}^n$ kompakt mit Innerem K^{int} . Sei \mathcal{O} eine offene Umgebung von K und $\phi \in C^{m+1}(\mathcal{O})$ für ein $m \in \mathbb{N}$ reell mit $\nabla\phi \neq 0$ auf K . Dann gilt für jedes $u \in C_0^l(K^{int})$ mit $m \geq l \in \mathbb{N}$ und $\omega \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$

$$\left| \int d^k e^{-i\omega\phi(k)} u(k) \right| \leq c_l |\omega|^{-l} \|u\|_{l, \infty}, \quad (4.94)$$

wobei c_l von l und ϕ abhängt und

$$\|u\|_{l, \infty} = \sum_{|\alpha| \leq l} \sup_k |(\partial^\alpha u)(k)|. \quad (4.95)$$

Sei

$$\begin{aligned} \mathcal{M} := \{ \phi \in C^{l+1}(\mathcal{O}) \mid \exists k_0 > 0 : |\nabla\phi(k)| > k_0 \ \forall k \in K \\ \text{und } \exists M < \infty \cdot \sum_{2 \leq |\alpha| \leq l+1} \sup_{k \in K} |(\partial^\alpha \phi)(k)| < M \}, \end{aligned} \quad (4.96)$$

dann kann c_l gleichmäßig in $\phi \in \mathcal{M}$ gewählt werden.

Bemerkung 4.18 Hier ist der Grund ersichtlich, warum im ersten Schritt des Beweises des „Flux-across-Surfaces“-Satzes 4.14 die Bedingung $0 \notin \text{supp}(U_+\psi)$ gestellt wurde, denn bei der Anwendung vom Satz der stationären Phase 4.17 ist $k \geq k_0$ wesentlich, um stationäre Punkte auszuschließen

Dies wenden wir nun an.

Lemma 4.19 Für

$$h(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) := \int d^3k e^{-i\frac{k^2t}{2}} e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \lambda(\mathbf{y}, \mathbf{k}) \quad (4.97)$$

gibt es für jedes $l \in \mathbb{N}$ ein $c_l \geq 0$, so daß für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^3, t > 0$

$$h(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \leq c_l (1 + x + t)^{-l} \|\lambda\|_{l,\infty}(\mathbf{y}). \quad (4.98)$$

Beweis Da nach Voraussetzung $\lambda(\mathbf{y}, \cdot) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$, gibt es ein $K \subset \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ kompakt mit Innerem K^{int} , so daß $\lambda(\mathbf{y}, \cdot) \in C_0^\infty(K^{int})$ und ein k_0 , so daß für alle $\mathbf{k} \in \text{supp}(\widehat{U_+\psi})$ gilt, daß $k \geq k_0$.

Wir setzen

$$\phi_{\mathbf{x},\mathbf{y},t}(k) := \frac{\frac{k^2t}{2} + k|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}{t + |\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \quad (4.99)$$

und $\omega = t + |\mathbf{x}-\mathbf{y}|$, so daß

$$h(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \int d^3k e^{-i\omega\phi_{\mathbf{x},\mathbf{y},t}(k)} \lambda(\mathbf{y}, \mathbf{k}) \quad (4.100)$$

Weiter ist für $K \subset \mathcal{O} := \mathbb{R}^3$ die Familie $\phi_{\mathbf{x},\mathbf{y},t} \in C^\infty(\mathcal{O})$ für $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \mathbf{y} \in \text{supp}(V), t > 0$, und da

$$|\nabla_k \phi_{\mathbf{x},\mathbf{y},t}(k)| = \frac{kt + |\mathbf{x}-\mathbf{y}|}{t + |\mathbf{x}-\mathbf{y}|} = \frac{k + |\mathbf{x}-\mathbf{y}|t^{-1}}{1 + |\mathbf{x}-\mathbf{y}|t^{-1}}, \quad (4.101)$$

ist

$$\sup_{\mathbf{x},\mathbf{y} \in \mathbb{R}^3, t > 0, k \geq k_0} |\nabla_k \phi_{\mathbf{x},\mathbf{y},t}(k)| \geq \min(1, k_0) > 0. \quad (4.102)$$

Die höheren Ableitungen sind nach oben beschränkt, und wir können nun Satz 4.17 direkt anwenden. ■

Die Funktion $\|\lambda\|_{l,\infty}(\mathbf{y})$ ist nach Voraussetzung beschränkt. Daher ergibt sich mit Lemma 4.19, unter Beachtung von $V \in C_0^\infty$, aus 4.90 und 4.92, daß auch

$$|\beta(\mathbf{x}, t)| \leq c_l (1 + x + t)^{-l} \quad (4.103)$$

$$|\nabla \beta(\mathbf{x}, t)| \leq c_l (1 + x + t)^{-l} \quad (4.104)$$

für jedes $l \in \mathbb{N}$ erfüllt ist. Für $l \geq 3$ sind die Bedingungen *i*) und *ii*) in Lemma 4.16 erfüllt. Damit ist der erste Schritt des Beweises beendet.

Nun zu den kleinen k -Werten Wir entnehmen dem Beweis in Schritt 1, daß wir nur noch den Term

$$\beta(\mathbf{x}, t) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3 k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \widehat{U}_+ \psi(\mathbf{k}) \eta(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \quad (4.105)$$

für $\widehat{U}_+ \psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ abschätzen müssen Wir prüfen die Bedingungen *i*) und *ii*) in Lemma 4.16 nach. Sei $\epsilon > 0$ und $h \in C_0^\infty(K_{2\epsilon})$ mit $h_\epsilon(\mathbf{k}) = 1$ für $k \leq \epsilon$ Damit schreiben wir

$$\begin{aligned} \beta(\mathbf{x}, t) &= (2\pi)^{-3/2} \int d^3 k h_\epsilon(\mathbf{k}) \hat{g}(\mathbf{k}) \eta(\mathbf{x}, \mathbf{k}) e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \\ &+ (2\pi)^{-3/2} \int d^3 k (1 - h_\epsilon(\mathbf{k})) \hat{g}(\mathbf{k}) \eta(\mathbf{x}, \mathbf{k}) e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \\ &=: I_1^\epsilon(\mathbf{x}, t) + I_2^\epsilon(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (4.106)$$

Nun ist I_2^ϵ von der Form, die bereits behandelt ist, denn $g(\mathbf{k})(1 - h_\epsilon(\mathbf{k})) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3 \setminus \{0\})$, so daß nach Lemma 4.19 für alle $l \in \mathbb{N}$ ein $c_l < \infty$ existiert mit

$$I_2^\epsilon(\mathbf{x}, t) \leq c_l (1 + x + t)^{-l}. \quad (4.107)$$

Die Aussage des Satzes 4.17, der z.B. in [62] S. 37 zitiert ist, basiert auf der partiellen Integration

$$\int dk e^{i\omega\phi(k)} u(k) = (-i\omega)^{-l} \int dk e^{i\omega\phi(k)} \left[\left(\frac{\partial}{\partial k_1} \left[\frac{\partial \phi}{\partial k_1} \right]^{-1} \right)^l u \right](k). \quad (4.108)$$

Mit unserer Wahl von ϕ in 4.99 sehen wir leicht, daß $c_l = O(\epsilon^{-l})$. Also ist

$$a_2^\epsilon(R, t) := R^2 \sup_{\mathbf{x} \in \partial K_R} I_2^\epsilon(\mathbf{x}, t) \leq cR^2 O(\epsilon^{-l}) (1 + R + t)^{-l} \quad (4.109)$$

für ein $c < \infty$. Nach 4.87 und den Voraussetzungen an ϕ , sowie der Bedingung $\text{supp}(V) \subset K_r$ für ein $r < \infty$, gilt für $x \geq 2r \sup_{\mathbf{k} \in \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}} |\eta(\mathbf{x}, \mathbf{k})| \leq c \frac{1}{x}$ für ein $c < \infty$, so daß

$$a_1^\epsilon(R, t) := R^2 \sup_{\mathbf{x} \in K_R} I_1^\epsilon(\mathbf{x}, t) \leq c\epsilon^3 R \quad (4.110)$$

für ein $c < \infty$.

Wir wählen nun $\epsilon = \epsilon(R, t) := R^{-x} (1 + t)^{-x}$ für ein $1/2 > x > 1/3$, so daß

$$a_1^\epsilon(R, t) \leq cR^{1-3x} (t + 1)^{-3x}, \quad (4.111)$$

und somit *i*) und *ii*) von Lemma 4.16 erfüllt sind. Weiter ist

$$\begin{aligned} a_2^\epsilon(R, t) &\leq c(t + 1)^{-3x} \frac{R^{(l+2)x} (t + 1)^{(l+3)x}}{(1 + R + t)^l}, \\ &\leq 1 \text{ für } l \text{ groß genug} \end{aligned} \quad (4.112)$$

so daß für l und R_0 groß genug $\sup_{R \geq R_0} a_2^\epsilon(R, t) < c'(1 + t)^{-3x}$ und für alle $t > 0$ $\lim_{R \rightarrow \infty} a_2^\epsilon(R, t) = 0$ und damit die Bedingungen *i*) und *ii*) von Lemma 4.16 erfüllt sind.

Die Abschätzung des Terms $\nabla \beta$ geht ganz analog. Damit ist auch der zweite Schritt des Beweises beendet. ■

Kapitel 5

Erweiterungen, Bemerkungen, Folgerungen

5.1 Zu langreichweitigen Potentialen

Es ist wohlbekannt, daß für langreichweitige Potentiale, d.h. $V(\mathbf{x}) = O(x^{-\epsilon})$, $\epsilon \leq 1$, die Wellenoperatoren (siehe auch Kap. 5.6) nicht existieren. Üblicherweise verwendet man die Methode von COOK, um die Existenz von $s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} e^{iHt} e^{-iH_0 t}$ zu zeigen. Dieser Limes existiert für $\psi \in \mathcal{H}$, falls $\int_1^\infty dt \|\frac{d}{dt} e^{iHt} e^{-iH_0 t} \psi\| = \int_1^\infty dt \|V e^{-iH_0 t} \psi\| < \infty$. (siehe [66], Satz XI 4) Diese Methode scheitert für das COULOMB-Potential $V(\mathbf{x}) = -\frac{1}{x}$, denn $\|\frac{1}{x} e^{-iH_0 t} \psi\| \notin L^1([1, \infty), dt)$. Dies folgt heuristisch aus der Beobachtung, daß für freie Bewegung im wesentlichen $x(t) = pt$, so daß $V(x) = -x^{-1}$ tatsächlich die Grenze darstellt, denn t^{-1} ist nicht integrierbar über $[1, \infty)$. DOLLARD [28] entwickelte eine Methode, um „modifizierte Wellenoperatoren“ zu definieren, um auch das COULOMB-Potential (und in ähnlicher Weise eine große Klasse langreichweitiger Potentiale [23]) einer zeitabhängigen Analyse zugänglich zu machen. Anstatt die Existenz von einem $\phi \in \mathcal{H}$ zu fordern, so daß $\lim_{t \rightarrow \infty} \|e^{-iHt} \psi - e^{-iH_0 t} \phi\| = 0$, wird verlangt, daß ein $\phi \in \mathcal{H}$ existiert, so daß

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|e^{-iHt} \psi - U^D(t) \phi\| = 0 \quad (5.1)$$

mit geeigneter „modifizierter“ Vergleichsdynamik $U^D(t) := e^{-iH_0 t - if(H_0) \log t}$. Um nun wieder die Methode von COOK für $s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} e^{iHt} U^D(t)$ anwenden zu können, muß f so gewählt werden, daß

$$\|(\frac{1}{x} - t^{-1} f(H_0)) U^D(t)\| \in L^1[1, \infty) \quad (5.2)$$

Mit der naheliegenden Wahl $f(H_0) = p^{-1}$ (aufgefaßt als Multiplikationsoperator im FOURIER-Raum) kann man erwarten, daß sich ein genügend schneller Abfall in t ergibt.

Das ist die Beweisidee von Satz XI.71 in [66] zur Existenz der modifizierten Wellenoperatoren, in dem allerdings eine etwas andere Vergleichsdynamik gewählt wird. Die Wahl von f ist natürlich nicht eindeutig festgelegt.

Nun zur physikalischen Interpretation. Im Beweis von Satz XI.71 in [66]) wird gezeigt, daß es eine reell-wertige Funktion $g(\mathbf{x}, t)$ gibt, so daß

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|e^{-iHt}\psi(\mathbf{x}) - e^{ig(\mathbf{x},t)}(it)^{-3/2} e^{i\frac{\mathbf{x}^2}{2t}} \hat{\phi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right)\|_2 = 0. \quad (5.3)$$

Analoges gilt für die FOURIER-Transformierten. Damit folgt, daß die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für Ort und „Impuls“ (siehe Kap. 5.2 und Kap. 5.8) der Funktion ψ_t gegen die von $\phi_t = e^{-iH_0 t} \phi$ konvergieren, obwohl die L^2 -Norm der Differenz $\|\psi_t - \phi_t\|_2$ nicht gegen Null konvergiert – sonst existierten ja die unmodifizierten Wellenoperatoren (Bem. nach Kor 2 in XI 9 in [66]). Dies wird als die physikalische Begründung angegeben, mit der das Konzept der modifizierten Wellenoperatoren motiviert wird (Bemerkung nach Satz XI.71 in [66]).

Wichtiger für die Zwecke der (Standard)-Streutheorie ist eigentlich, daß auch für langreichweitige Potentiale der „Scattering-into-Cones“-Satz mit

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_C d^3x |\psi_t(\mathbf{x})|^2 = \int_C d^3v |\hat{\phi}(\mathbf{v})|^2 \quad (5.4)$$

erfüllt ist. Dies folgt wie im Beweis von Satz 4.5 sofort aus 5.3 und Lemma 4.1, denn

$$e^{-iHt}\psi(\mathbf{x}) = (it)^{-3/2} e^{ig(\mathbf{x},t)} e^{i\frac{\mathbf{x}^2}{2t}} \hat{\phi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right) + N(\mathbf{x}, t) \quad (5.5)$$

mit $\lim_{t \rightarrow \infty} \|N(\cdot, t)\| = 0$.

Für unsere Zwecke ist aber wesentlich, daß auch für langreichweitige Potentiale der „Flux-across-Surfaces“-Satz erfüllt ist, also daß für alle Kegel C

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^\infty dt \int_{C \cap \partial K_R} |\mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu| d\sigma = \int_C d^3v |\hat{\phi}(\mathbf{v})|^2 \quad (5.6)$$

gilt, bzw. daß die Bedingungen von Lemma 4.7, die ja – im Gegensatz zu den modifizierten Wellenoperatoren – von einer „Vergleichsdynamik“ unabhängig formulierbar sind,

$$\mathbf{j}^{\psi_t}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}}{t} t^{-3} |\hat{\phi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right)|^2 + N(\mathbf{x}, t) \quad (5.7)$$

mit

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_T^\infty dt \int_{\partial K_R} |N(\mathbf{x}, t) \cdot d\sigma| = 0, \quad (5.8)$$

erfüllt sind. Man beachte hierbei, daß der Term $e^{ig(\mathbf{x},t)}$, der zwar bei der Bildung des Betragsquadrates im „Scattering-into-Cones“-Satz wegfällt, sehr wohl zum Strom, der ja im „Flux-across-Surfaces“-Satz die wesentliche Rolle spielt, beiträgt.

Aus dem Beweis der Existenz der verallgemeinerten Wellenoperatoren bekommen wir nicht ohne weiteres punktweise Aussagen, die wir zur Abschätzung des Stroms benötigen. Im kurzreichweitigen Fall dienen uns die Lösungen der LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung dazu, diese Abschätzungen durchzuführen, indem wir die Restterme der asymptotischen Formel kontrollieren konnten. Um analog vorzugehen, benötigt man also eine Entsprechung der verallgemeinerten Eigenfunktionen oder eine andere Möglichkeit, den Integranden des Operators e^{-iHt} zu kontrollieren.

5.2 Zur asymptotischen Geschwindigkeit

Eine für die Streutheorie offenbar interessante Größe ist die asymptotische Geschwindigkeit $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \mathbf{x}(t)$ und damit die asymptotische Austrittsrichtung $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) \left| \frac{d}{dt} \mathbf{x}(t) \right|^{-1}$. Mit dem „Flux-across-Surfaces“-Satz haben wir indirekt „schwache“ Aussagen über die Grenzverteilung dieser Größen erhalten, die allerdings für den Vergleich mit Experimenten ausreichend sind. Was kann man nun über die fast-sichere Existenz des Grenzwerts dieser Zufallsgrößen sagen?

Im Rahmen der stochastischen Mechanik von NELSON, die der BOHMSchen Mechanik eng verwandt ist [38], konnte D. SHUCKER [70] zeigen, daß für $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ der Grenzwert $\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{x}(t)/t$ $|\psi|^2$ -fast sicher existiert. Es zeigt sich, daß der Satz von SHUCKER samt Beweis ohne Schwierigkeiten auch für BOHMSche Mechanik verwendet werden kann. Die Existenz einer asymptotischen Geschwindigkeit kann allerdings nicht aus dem Resultat abgeleitet werden (In der stochastischen Mechanik existieren keine Geschwindigkeiten). Eine kurze Überlegung zeigt, daß zwar die Existenz einer asymptotischen Geschwindigkeit die Existenz von $\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{x}(t)/t$ impliziert, aber nicht umgekehrt (Beispiel. $x(t) = v_0 t + \sin t$). Genauer gilt folgender

Satz 5.1 Sei H_0 der freie HAMILTON-Operator auf $L^2(\mathbb{R}^3)$, $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$, $\psi_t := e^{-iH_0 t} \psi_0$ und $\mathbf{x}(t)$ die Lösung der BOHMSchen Gleichung 2.6. Dann existiert für \mathbb{P}^ψ -fast alle Anfangsbedingungen der Grenzwert $\mathbf{v}_\infty := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\mathbf{x}(t)}{t}$ der BOHMSchen Bewegung. Die Verteilung μ der Zufallsvariablen \mathbf{v}_∞ hat die Dichte $|\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2$.

Der „Scattering-into-Cones“-Satz 4.2 ist – wie man leicht sieht – ein Korollar des Satzes 5.1. Denn zum einen impliziert fast sichere Konvergenz schwache Konvergenz. Weiter ist $\mu(\partial C) = 0$, da nach Satz 5.1 μ eine Dichte hat und ∂C eine Nullmenge ist. Damit folgt ([74] S. 322), daß auch $\mathbb{P}^\psi(\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\mathbf{x}(t)}{t} \in C) = \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P}^\psi(\frac{\mathbf{x}(t)}{t} \in C)$.

5.3 Zu N -Teilchen-Problemen

Bei einer Verallgemeinerung unserer Resultate auf N -Teilchen-Probleme (siehe auch [25]) – für $\psi \in \mathcal{H} := L^2(\mathbb{R}^{3N})$ – muß man folgendes beachten: Es ist nun möglich, daß sich die einzelnen Teilchen zu gebundenen Zuständen zusammenschließen, die sich dann als „Cluster“ frei bewegen. Da die Bewegung in einem gebundenen Zustand räumlich lokalisiert sein sollte (siehe Kap. 5.5), sollten für alle Teilchen – auch diejenigen in einem Cluster – die Grenzwerte $\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{x}_i/t$ existieren, wobei \mathbf{x}_i den Ort des i -ten Teilchens bezeichnet. Eine asymptotische Geschwindigkeit wird im allgemeinen nicht existieren, denn die Bewegung innerhalb eines Clusters wird typischerweise quasiperiodisch sein.

Mit $x := (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ sollte für $t \rightarrow \infty$ die asymptotische Formel

$$e^{-iHt}\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \rightarrow (it)^{-3N/2} e^{i \sum_{i=1}^N \frac{x_i^2}{2t}} \hat{\phi}(\mathbf{x}_1/t, \dots, \mathbf{x}_N/t) \quad (5.9)$$

für ein gewisses $\phi \in L^2(\mathbb{R}^{3N})$ gelten. Die Information über mögliche Cluster-Bildung (siehe [48]) steckt dabei in $\phi = U_+\psi$. Indem wir den Strom wieder (vgl. Lemma 4.7) schreiben als

$$j^{\psi_t}(x) = \frac{x}{t} t^{-3N} |\hat{\phi}(\frac{x}{t})|^2 + N(x, t), \quad (5.10)$$

mit „vernachlässigbarem“ N , lautet dann der „Flux-across-Surfaces“-Satz:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{R\Delta_1} \dots \int_{R\Delta_N} \mathbf{j}_t^1 d\sigma_1 \dots \mathbf{j}_t^N d\sigma_N = \int_{C_1 \times \dots \times C_N} d^3k_1 \dots d^3k_N |\hat{\phi}(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N)|^2. \quad (5.11)$$

Die asymptotische Vollständigkeit von N -Teilchen-Wellenoperatoren wurde im allgemeinsten Fall von DEREZIŃSKI (in [23], mit umfangreichen Literaturangaben) bewiesen.

Bemerkung 5.2 Satz 5.1 gilt auch für die freie Bewegung von N -Teilchen [70].

5.4 Zum asymptotischen Streuquerschnitt und der S -Matrix

Der „Flux-across-Surfaces“-Satz 4.14 ist für $\psi \in C^\infty(H)$ formuliert, so daß wir mit Satz 2.4 auch die *physikalische Interpretation* der Aussage von Satz 4.5 als asymptotischer Teilchenfluß haben. Damit ist die Argumentation aus Kapitel 3 anwendbar, die zeigt, daß aus dem „Flux-across-Surfaces“-Satz 4.14 die Formel für die asymptotische Austrittsortverteilung

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}_e \in R\Delta) = \int_C d^3v |\widehat{U_+\psi}(\mathbf{v})|^2 \quad (5.12)$$

folgt. Wir beschreiben, wie wir von unserer fundamentalen Formel für das Streuquerschnittsmaß

$$\sigma(\Delta) := \lim_{R \rightarrow \infty} \mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}_e \in R\Delta) = \int_C d^3k |(\widehat{U_+}\psi)(\mathbf{k})|^2 \quad (5.13)$$

zu den gewohnten Formeln der Streutheorie gelangen. Das Streuquerschnittsmaß hängt von der Anfangswellenfunktion ab, die in typischen Streuexperimenten gar nicht im Detail bekannt ist. Wir fokussieren nun auf die allein in U_+ versteckte Abhängigkeit des Streuquerschnitts vom Potential. Sei $U_- := s\text{-}\lim_{t \rightarrow -\infty} e^{iH_0 t} e^{-iHt}$ unitär auf \mathcal{H}_{ac} , d.h. für $\psi \in \mathcal{H}_{ac}$ sei

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \|e^{-iHt}\psi - e^{-iH_0 t} U_- \psi\|_2 = 0, \quad (5.14)$$

und $\psi = U_-^\dagger \psi_{in}$. Dies in 5.13 eingesetzt liefert mit $S := U_+ U_-^\dagger$

$$\sigma(\Delta) = \int_C d^3k |(\widehat{U_+}\psi)(\mathbf{k})|^2 = \int_C d^3k |(S\widehat{\psi}_{in})(\mathbf{k})|^2 \quad (5.15)$$

Nun können wir noch $\psi_{in} = |\mathbf{k}'\rangle$ als ebene Welle ansetzen, so daß in 5.15 das Quadrat von $\langle \mathbf{k} | S | \mathbf{k}' \rangle$ auftritt.

Wir werden im folgenden das Symbol $|\widetilde{\mathbf{k}}\rangle$ für die verallgemeinerte Eigenfunktion $U_- |\mathbf{k}\rangle$ verwenden. Die Funktionen $\phi_-(\mathbf{x}, \mathbf{k}) := (2\pi)^{3/2} \langle \mathbf{x} | U_- |\mathbf{k}\rangle$ genügen auch einer LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung,

$$\phi_-(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} - \frac{1}{2\pi} \int \frac{e^{i\mathbf{k}(\mathbf{x}-\mathbf{y})}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} V(\mathbf{y}) \phi_-(\mathbf{y}, \mathbf{k}) d^3y, \quad (5.16)$$

allerdings mit dem Vorzeichen „+“ im Exponenten des zweiten Terms (vgl. 3.27).

Mit $I = U_- U_-^\dagger$, $S = U_+ U_-^\dagger$ und $|\mathbf{k}'\rangle = U_- |\widetilde{\mathbf{k}}'\rangle$ berechnen wir (siehe auch [66] S. 108)

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} | S - I | \mathbf{k}' \rangle &= \langle \mathbf{k} | U_+ - U_- | \widetilde{\mathbf{k}}' \rangle \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle \mathbf{k} | \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\epsilon|t|} e^{iH_0 t} (-iV) e^{-iHt} |\widetilde{\mathbf{k}}' \rangle \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\epsilon|t|} e^{ik^2 t/2} e^{-ik'^2 t/2} \langle \mathbf{k} | (-iV) | \widetilde{\mathbf{k}}' \rangle \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{2\epsilon}{(k^2/2 - k'^2/2)^2 + \epsilon^2} \langle \mathbf{k} | V | \widetilde{\mathbf{k}}' \rangle \\ &= (-2\pi i) \delta(k^2/2 - k'^2/2) \langle \mathbf{k} | V | \widetilde{\mathbf{k}}' \rangle, \end{aligned} \quad (5.17)$$

wobei wir $2\epsilon((k^2 - k'^2)^2 + \epsilon^2)^{-1} \rightarrow 2\pi\delta(k^2 - k'^2)$ verwendet haben. Üblicherweise verwendet man die Bezeichnung „ T -Matrix“ für den Ausdruck

$$T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \langle \mathbf{k} | V | \widetilde{\mathbf{k}}' \rangle = (2\pi)^{-3} \int d^3x e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} V(\mathbf{x}) \phi_-(\mathbf{x}, \mathbf{k}') \quad (5.18)$$

Setze also¹

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - 2\pi i \delta(k^2/2 - k'^2/2) T(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (5.19)$$

¹Beachte, daß die δ -Distribution durch die Idealisierung $|\psi_{in} = |\mathbf{k}'\rangle$ kommt, d.h. δ sollte im folgenden „cum grano salis“ genommen werden. Wir sollten uns δ als Regularisierung von ψ_{in} vorstellen

Wählen wir nun einen Kegel mit $\mathbf{k}' \notin C$, so trägt der Term $\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ nichts zum Integral in 5.15 bei, während der zweite Term die Integration über den ganzen Kegel auf die Oberfläche $k = k'$ einschränkt. Für solche Kegel erhalten wir (modulo Normierung) also die „übliche Formel“ (siehe [66] S. 111) des Streuquerschnitts, mit $\mathbf{k} =: \mathbf{e}k, \mathbf{k}' = \mathbf{e}'k$,

$$\sigma(\Delta) = \int_{\Delta} d\Omega |T(\mathbf{e}k, \mathbf{e}'k)|^2. \quad (5.20)$$

Bemerkung 5.3 Der „totale Wirkungsquerschnitt“ $\sigma_{tot} := \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$, der gemäß unserer Definition 5.13 natürlich gleich eins ist, ist mit σ aus 5.20 k -abhängig – der „ungestreute“ Anteil ist ja ausgeblendet worden – und kann als Kenngröße für die „Ausdehnung“ des Potentials für Strahlen der Wellenzahl \mathbf{k} verwendet werden.

Bemerkung 5.4 Den schnellsten Zugang zu der Formel 5.15 liefert folgende rein quantenmechanische Heuristik: Der freie Anfangszustand ψ_{in} wird durch die S -Matrix $S := U_+ U_-^\dagger$ in den Endzustand $\psi_{out} := S\psi_{in}$ transformiert. Die komplexe „Wahrscheinlichkeitsamplitude“ im Endzustand den Impuls $|\mathbf{k}\rangle$ zu finden ist gegeben durch $\langle \mathbf{k} | S | \psi_{in} \rangle$. Damit ist die Wahrscheinlichkeit, daß der Impuls in einem Kegel C im Raumwinkel Δ liegt, durch das Streuquerschnittsmaß $\sigma(\Delta) := \int_C d^3k |\langle \mathbf{k} | S | \psi_{in} \rangle|^2$ gegeben.

Bemerkung 5.5 (zum Übergang von POVs zu PVs)

Das Streuquerschnittsmaß in Gleichung 5.13 definiert ein Projektions-Operator-wertiges-Maß (PV) $\{P_\Delta\}_{\Delta \in \mathcal{B}(S^2)}$, gegeben durch

$$P_\Delta := U_+^\dagger \mathcal{F}^{-1} P_C \mathcal{F} U_+. \quad (5.21)$$

Damit ist in 5.13 $\sigma(\Delta) = (\psi, P_\Delta \psi)$. Analog ergibt sich mit

$$P_\Delta := S^\dagger \mathcal{F}^{-1} P_C \mathcal{F} S \quad (5.22)$$

in 5.15 $\sigma(\Delta) = (\psi, P_\Delta \psi)$. Wir sehen also, daß die Statistik der Austrittsorte, die im allgemeinen nicht durch einen selbstadjungierten Operator beschrieben werden kann und die unter der CPC durch ein POV gegeben ist (siehe Bem. 2.8 und [20]), im Grenzwert großer Entfernungen, für den die Formel 5.13 abgeleitet wurde, durch ein PV und damit durch einen selbstadjungierten Operator gegeben ist.

Bemerkung 5.6 (zur zeitunabhängigen Streutheorie)

Wir wollen nun noch den Zusammenhang mit der „naiven“ zeitunabhängigen Streutheorie (siehe Kap. 1.3) herstellen. Lösungen der stationären SCHRÖDINGER-Gleichung,

die sich asymptotisch wie $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikx}}{x}$ verhalten, bekommen wir aus der LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung 5.16 Für große Entfernungen vom Streuer ($|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^{-1} \approx x^{-1}$ und $e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \approx e^{ikx} e^{-ik\frac{\mathbf{x}}{x}\cdot\mathbf{y}}$)

$$\phi_-(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \approx e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \frac{1}{2\pi} \frac{e^{ikx}}{x} \int d^3y e^{-ik\frac{\mathbf{x}}{x}\cdot\mathbf{y}} V(\mathbf{y}) \phi_-(\mathbf{y}, \mathbf{k}). \quad (5.23)$$

In sphärischen Koordinaten mit \mathbf{k} als z -Achse definiert \mathbf{x} die Winkel θ, ϕ , und wir setzen

$$f(\theta, \phi) := \frac{1}{2\pi} \int d^3y e^{-ik\frac{\mathbf{x}}{x}\cdot\mathbf{y}} V(\mathbf{y}) \phi_-(\mathbf{y}, \mathbf{k}) \quad (5.24)$$

Dies ist einerseits die Streuamplitude im Ortsraum, während man durch die Definition $\mathbf{k}' = k\frac{\mathbf{x}}{x}$ die Streuamplitude im Impulsraum gewinnt, die offenbar (modulo Normierung) gleich der T -Matrix 5.18 ist. Damit entspricht der Streuquerschnitt der zeitunabhängigen Streutheorie

$$\sigma(\Delta) := \int_{\Delta} d\Omega |f(\theta, \phi)|^2 \quad (5.25)$$

der Formel 5.20, die sich aus der asymptotischen Auswertung von 5.13 ergeben hat. Damit ist das „Funktionieren“ der (zeitunabhängigen) „naiven“ Streutheorie begründet.

In REED-SIMON [66] S. 356 wird dafür folgende Begründung angegeben. Aus den stationären Lösungen der LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung 5.16 lassen sich zeitabhängige Lösungen konstruieren. Für $\psi(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3k \phi_-(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \hat{g}(\mathbf{k})$ ist

$$\psi_t(\mathbf{x}) = (e^{-iHt}\psi)(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2}} \phi_-(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \hat{g}(\mathbf{k}), \quad (5.26)$$

und mit der Ersetzung $\phi_-(\mathbf{x}, \mathbf{k}) \approx e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} - f(\theta, \phi) \frac{e^{ikx}}{x}$ ist

$$\psi_t(\mathbf{x}) \approx (2\pi)^{-3/2} \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2} + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \hat{g}(\mathbf{k}) + (2\pi)^{-3/2} f(\theta, \phi) x^{-1} \int d^3k e^{-i\frac{k^2 t}{2} + ikx} \hat{g}(\mathbf{k}) \quad (5.27)$$

Für $t \rightarrow \infty$ tragen beide Terme – die einfallende Welle und die auslaufende Kugelwelle – bei, während für $t \rightarrow -\infty$ nur der erste Term beiträgt, denn im zweiten Term sind wegen $\frac{d}{dk}(-\frac{k^2 t}{2} + kx) = -kt + x$ und $k \geq 0, t < 0$ und große x keine stationären Punkte im Exponenten.

Man beachte, daß bei der Entwicklung von ψ_t nach $\phi_-(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ für $t \rightarrow \infty$ bei der Berechnung des Stroms Interferenzterme auftreten. Wir konnten mit der Verwendung von $\phi(\mathbf{k}, \mathbf{x})$ anstatt $\phi_-(\mathbf{k}, \mathbf{x})$ den „Flux-across-Surfaces“-Satz 4.14 im allgemeinen Fall beweisen, denn mit dieser Entwicklung trägt für $t \rightarrow +\infty$ nur der Term $e^{-iH_0 t} U_+ \psi$ bei, und der Strom ist damit leichter kontrollierbar.

Bemerkung 5.7 DOLLARD [24] schlägt vor, den Streuquerschnitt über

$$\sigma_D(\Delta) := \lim_{t \rightarrow \infty} \int_C d^3x |\psi_t(\mathbf{x})|^2 \quad (5.28)$$

zu *definieren*, und dieser Zugang wird übrigens in [66] S. 356 auch als der (einzige) mathematisch präzise Versuch, die Formel 5.25 für den Streuquerschnitt zu begründen, zitiert. Mit dem „Scattering-into-Cones“-Satz 4.3 folgt

$$\sigma_D(\Delta) = \int_C d^3k |(\widehat{U_+}\psi)(\mathbf{k})|^2, \quad (5.29)$$

in Übereinstimmung mit 5.13. Einen Versuch, daraus die Formel 5.25 abzuleiten, konnten wir jedoch in den Arbeiten von DOLLARD nicht finden.

Bemerkung 5.8 (zum Begriff des Stoßparameters in der Streutheorie)

Die $\rho = |\psi|^2$ verteilten Anfangspositionen entsprechen den zufallsverteilten Stoßparametern, die man in der klassischen Mechanik (vgl. [66] S. 15) zur Definition des Streuquerschnittes heranzieht. Zusätzliche Mittelungsprozeduren über zufallsverteilte Streuzentren wurden von JAUCH [48] und über die „Stoßparameter“ der in der Einfallsebene in Richtung a verschobenen Anfangswellenpakete ψ_a von WICHMAN [76] (siehe auch Kap. 7.3. in [3]) vorgeschlagen, um einen „effektiven Streuquerschnitt“ zu definieren

$$\sigma_{eff} := \int d^2a P(a) \int_C d^3v |\hat{\phi}_a(v)|^2. \quad (5.30)$$

Beide Ansätze sollen die Äquivalenz von zeitabhängiger und zeitunabhängiger Streutheorie (die Gleichheit von 5.25 und 5.20) demonstrieren.

Unsere Analyse legt nahe, daß diese Mittelungen nicht notwendig sind. Uns sind aber keine rigorosen Arbeiten zur Äquivalenz von 5.25 und 5.20 bekannt.

Bemerkung 5.9 (zur Ersetzung von ψ durch ψ_{in})

In unserer Ableitung der Formeln für den asymptotischen Streuquerschnitt sagten wir nicht, warum anstatt der „wahren“ Wellenfunktion ψ die Funktion $\psi_{in} := U_- \psi$ eingesetzt werden sollte. ψ_{in} wurde eingeführt, um an die bekannte Formel für den Streuquerschnitt anzuknüpfen, die von Details von ψ_{in} unabhängig ist. ψ_{in} wird durch die S -Matrix $S = U_+ U_-^\dagger$ auf $\psi_{out} = S \psi_{in}$ abgebildet. Die asymptotische Ersetzung von ψ durch ψ_{out} im Limes $t \rightarrow \infty$ haben wir dadurch begründet, daß die zugehörigen Flüsse asymptotisch übereinstimmen, so daß sie denselben Beitrag zum „Flux-across-Surfaces“ geben.

Nun, für ein zur Zeit Null weit entfernt präpariertes Wellenpaket, das sich auf das Streuzentrum hinbewegt, sollte so lange

$$e^{-iHt}\psi \approx e^{-iH_0t}\psi \quad (5.31)$$

gelten, bis das Wellenpaket merklich in den Bereich des Potentials gelangt. Das heißt aber, daß für solche Wellenpakete $\|(U_- - 1)\psi\|$ klein wird, oder, anders gesagt, daß anfänglich ψ „fast“ eine Eigenfunktion von U_- zum Eigenwert 1 sein sollte. Wann immer also die

Formel 5.15 für den asymptotischen Streuquerschnitt verwendet wird, so geschieht dies mit einem Fehler der Größenordnung $\|(U_- - 1)\psi\|^2$, der für hinreichend weit entfernte einlaufende Pakete klein sein sollte. Offenbar ist die Ersetzung von ψ durch $U_- \psi$ ein ganz geschickter Trick, um die Formel 5.13 auswerten zu können (siehe Rechnung 5.17)

Die rigorose Ableitung der Formel 5.15 aus 5.13 ist von größtem Interesse, denn damit wäre zusammen mit dem „Flux-across-Surfaces“-Satz die eigentliche Begründung für die Gültigkeit der Formel 5.15 gegeben. Uns sind keine rigorosen Arbeiten dazu bekannt.

Bemerkung 5.10 (zum Ausschluß der kleinen Geschwindigkeiten)

Im Gültigkeitsbereich der Anwendung der S -Matrix, zu dessen Abgrenzung ja zwei ganz verschiedene Grenzprozesse zu betrachten sind, kann man folgendes physikalisches Argument zum Ausschluß der kleinen Geschwindigkeiten geben, die ja im Beweis von Satz 4.14 gesondert behandelt werden mußten. Eine typische Anfangswellenfunktion für Streuexperimente sollte keine Beiträge in einer Umgebung von $k = 0$ in ihrer FOURIER-Entwicklung haben. Falls die Ersetzung $\psi \approx U_- \psi$ gerechtfertigt ist, so hat die auslaufende Welle $U_+ \psi = S\psi$ aufgrund des Faktors $\delta(k^2/2 - k'^2/2)$ im Integralkern von S in 5.19 auch keine Beiträge in einer Umgebung von $k = 0$. Der Träger der FOURIER-Transformierten bleibt unter der Anwendung von S invariant, in dem Sinn, daß aus $\text{supp}(\hat{\psi}) \in K_R \setminus K_r$, $0 < r < R < \infty$, auch $\text{supp}(\widehat{S\psi}) \in K_R \setminus K_r$ folgt. (Dies ist verknüpft mit der „Energieerhaltung“ der elastischen Streuung, die durch $[S, H_0] = 0$ ausgedrückt wird). Im allgemeinen Fall, insbesondere bei der Behandlung von „Zerfallsproblemen“ (siehe Beispiel 2.7), gibt es natürlich keinen Grund die kleinen k -Werte auszuschließen.

5.5 Zur Definition von Streuzuständen

In Textbüchern zur Quantenmechanik werden üblicherweise die Zustände im Punktspektrum als „gebundene“ Zustände bezeichnet und die Zustände im kontinuierlichen Spektrum als „Streuzustände“. Die Einsicht, daß der Begriff des gebundenen Zustands und des Streuzustands geometrisch über Lokalisierungseigenschaften in Raum und Zeit charakterisiert sein sollte, war entscheidend für die Entwicklung der modernen Streutheorie (siehe [67], [4], [27], [40], [73]). Wir wollen unsere Ergebnisse in diese Diskussion einordnen.

Die minimale Anforderung an Streuzustände ist dadurch gegeben, daß

$$\sigma : \mathcal{B}(\mathcal{S}^2) \rightarrow \mathbb{R}^+, \sigma(\Delta) := \lim_{R \rightarrow \infty} \mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}_e \in \Delta) \tag{5.32}$$

ein Wahrscheinlichkeitsmaß ist. Für gebundene Zustände mag man

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \sup_{T \geq 0} \mathbb{P}^\psi(N_{tot}^{\partial K_R, [0, T]} > 0) = 0 \tag{5.33}$$

fordern, wobei $N_{tot}^{\partial K_R, [0, T]}$ die Anzahl von Kreuzungen der Kugeloberfläche ∂K_R im Zeitintervall $[0, T]$ bezeichnet. Diese Definitionen sind zwar physikalisch naheliegend, aber im allgemeinen schwer zu handhaben. Die folgenden Definitionen sind für unsere Zwecke ausreichend: Für einen selbstadjungierten Operator H sei die Menge der Streuzustände

$$\mathcal{M}_{Streu}(H) := \{\psi \in C^\infty(H) \mid \sigma : \mathcal{B}(\mathcal{S}^2) \rightarrow \mathbb{R}^+, \sigma(\Delta) := \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{\Delta_R} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma \text{ ist ein Wahrscheinlichkeitsmaß}\}, \quad (5.34)$$

wobei vereinbart ist, daß der Strom mit der auf 1 normierten Wellenfunktion zu berechnen ist. Die Menge der gebundenen Zustände sei

$$\mathcal{M}_{gebunden}(H) := \{\psi \in C^\infty(H) \mid \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{\partial K_R} |\mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma| = 0\}. \quad (5.35)$$

Den ganzen Rest bezeichnen wir als „singuläre Zustände“

$$\mathcal{M}_{sing} := \mathcal{H} \setminus (\mathcal{M}_{Streu} \cup \mathcal{M}_{gebunden}). \quad (5.36)$$

Wir finden für unsere geometrische Definition folgenden

Satz 5.11 *Die in 5.34 - 5.36 definierten Mengen sind paarweise disjunkt und*

$$\mathcal{M}_{Streu} \cup \mathcal{M}_{gebunden} \cup \mathcal{M}_{sing} = \mathcal{H}. \quad (5.37)$$

Sei H lokal kompakt, d.h. für alle Paare $E \in \mathbb{R}, R \geq 0$ sei der Operator $P_{K_R}^\pm P_{(-\infty, E]}^H$ kompakt. Dann gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{gebunden} &\subset \mathcal{H}_{pp} \cap C^\infty(H) \\ \mathcal{M}_{Streu} &\subset \mathcal{H}_{cont} \cap C^\infty(H) \end{aligned} \quad (5.38)$$

Weiter gilt für $\psi \in \mathcal{M}_{Streu}$, daß $\lim_{t \rightarrow \infty} \|P_{K_R} \psi_t\| = 0$ für alle $R > 0$.

Beweis Da für $\psi \in \mathcal{M}_{Streu}$ insbesondere $\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty \int_{\partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma = 1$ erfüllt ist, folgt sofort der erste Teil der Behauptung.

Um den zweiten Teil zu beweisen, greifen wir auf eine andere Definition von Streuzuständen zurück. RUELLE [67] definiert für einen selbstadjungierten Operator H die Menge \mathcal{M}_{lv} der Streuzustände („lv“ steht für „leave“)

$$\mathcal{M}_{lv} := \{\psi \in \mathcal{H} : \forall R > 0 : \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \|P_{K_R} \psi_t\|^2 = 0\} \quad (5.39)$$

und die Menge der gebundenen Zustände \mathcal{M}_{bd} („bd“ steht für „bound“)

$$\mathcal{M}_{bd} := \{\psi \in \mathcal{H} : \forall \epsilon > 0 \exists R > 0 : \sup_{t \geq 0} \|P_{K_R^c} \psi_t\|^2 < \epsilon\}, \quad (5.40)$$

wobei jeweils $\psi_t := e^{-iHt}\psi$. Da $\|P_{K_R^c}\psi_t\|^2$ monoton fallend in R ist, gilt auch

$$\mathcal{M}_{bd} = \{\psi \in \mathcal{H} \cdot \limsup_{R \rightarrow \infty} \sup_{t \geq 0} \|P_{K_R^c}\psi_t\|^2 = 0\} \quad (5.41)$$

Für die so definierten Mengen gilt der folgende

Satz 5.12 *Sei $H = H_0 + V$ lokal kompakt. Dann ist $\mathcal{M}_{bd} = \mathcal{H}_{pp}(H)$, $\mathcal{M}_{lv} = \mathcal{H}_{cont}$.*

Der Beweis findet sich in [62] S. 24 und benutzt wesentlich das sogenannte „RAGE“-Theorem² (Satz XI.115 in [66]). Lokale Kompaktheit ist eine sehr schwache Forderung, die von vielen SCHRÖDINGER-Operatoren erfüllt wird.

Damit genügt es zu zeigen, daß $\mathcal{M}_{Streu} \subset \mathcal{M}_{lv}$ und $\mathcal{M}_{gebunden} \subset \mathcal{M}_{bd}$.

Sei dazu $\psi \in \mathcal{M}_{Streu}$, $\|\psi\| = 1$. Dann gilt insbesondere, unter Verwendung des GAUSS-schen Satzes

$$\begin{aligned} 1 &= \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{\partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma \\ &= \lim_{R \rightarrow \infty} \|P_{K_R}\psi_0\|^2 - \lim_{R \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} \|P_{K_R}\psi_t\|^2 \\ &= 1 - \lim_{R \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} \|P_{K_R}\psi_t\|^2. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Damit gilt für jedes $\psi \in \mathcal{M}_{Streu}$, daß $\lim_{R \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow \infty} \|P_{K_R}\psi_t\|^2 = 0$. Da $f(R) := \lim_{t \rightarrow \infty} \|P_{K_R}\psi_t\|^2 \geq 0$ monoton wachsend ist, folgt aus $\lim_{R \rightarrow \infty} f(R) = 0$, daß $f(R) = 0$ für alle $R \geq 0$. Damit ist dann auch $\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \|P_{K_R}\psi_t\|^2 = 0$, als CESÀRO-Mittel einer Funktion, die gegen Null strebt, und daher $\psi \in \mathcal{M}_{Streu}$.

Wir zeigen noch $\mathcal{M}_{gebunden} \subset \mathcal{M}_{bd}$. Sei dazu $\psi \in \mathcal{M}_{gebunden}$, $\|\psi\| = 1$. Dann gilt

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dt \int_{\partial K_R} |\mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu| d\sigma \\ &\geq \lim_{R \rightarrow \infty} \sup_{t \geq 0} \left| \int_0^t dt \int_{\partial K_R} \mathbf{j}^{\psi_t} \cdot \nu d\sigma \right| \\ &= \lim_{R \rightarrow \infty} \sup_{t \geq 0} \left| \|P_{K_R}\psi_0\|^2 - \|P_{K_R}\psi_t\|^2 \right| \\ &= \left| 1 - \liminf_{R \rightarrow \infty} \sup_{t \geq 0} \|P_{K_R}\psi_t\|^2 \right| = \limsup_{R \rightarrow \infty} \sup_{t \geq 0} \|P_{K_R^c}\psi_t\|^2. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Also gilt für $\psi \in \mathcal{M}_{gebunden}$, daß $\lim_{R \rightarrow \infty} \sup_{t \geq 0} \|P_{K_R}\psi_t\|^2 = 1$. ■

Es ist nicht zu erwarten, daß \mathcal{M}_{Streu} tatsächlich ein Unterraum von \mathcal{H}_{cont} ist, und es ist weiter nicht zu erwarten, daß \mathcal{M}_{Streu} mit der spektralen Aufspaltung $\mathcal{H}_{cont} = \mathcal{H}_{ac} \oplus \mathcal{H}_{sc}$ verträglich ist. Es ist also nicht von vorneherein ausgeschlossen, Zustände $\psi \in \mathcal{H}_{sc}$ im singulärstetigen Spektrum zu finden, die dennoch Streuzustände in unserem Sinne sind, d.h. es gilt nicht notwendig $\mathcal{M}_{Streu} \cap \mathcal{H}_{sc} = \emptyset$.

²Der Name „RAGE“ ist wegen Beiträgen von RUELLE, AMREIN, GEORGESCU und ENSS gewählt

5.6 Zur Bedeutung von Wellenoperatoren und zur asymptotischen Vollständigkeit

Der Beginn der zeitabhängigen Streutheorie mag mit der Arbeit von MØLLER [56] angesetzt werden, in der das Konzept der Wellenoperatoren einführt wird. Für einen Streuzustand $\psi \in \mathcal{H}$ erwartet man, daß es ein $\phi \in \mathcal{H}$ gibt, so daß $\lim_{t \rightarrow \infty} \|e^{-iHt}\psi - e^{-iH_0t}\phi\| = 0$. Dies ist äquivalent zur Forderung nach Existenz von $s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{iH_0t}e^{-iHt}$. Üblicherweise definiert man

$$\Omega_{\pm} := s\text{-}\lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{iHt}e^{-iH_0t} \quad (5.44)$$

im Gegensatz zu unserer Wahl

$$U_{\pm} := s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} e^{iH_0t}e^{-iHt}. \quad (5.45)$$

Die merkwürdige Vorzeichenkonvention ist mit dem Auftreten des „ $-i\epsilon$ “-Terms in der Ableitung der LIPPMANN-SCHWINGER-Gleichung 3.27 für den Fall $t \rightarrow +\infty$ verknüpft. Die vertauschte Reihenfolge von H und H_0 mag damit zusammenhängen, daß die Existenz von Ω_{\pm} leichter zu zeigen ist, als die von U_{\pm} .

Es ist wohlbekannt, daß die Forderung nach Existenz (siehe auch Kap. 5.1 zum langreichweitigen Fall) der Wellenoperatoren allein noch nicht ausreicht, um den Unterraum der physikalisch „vernünftigen“ Streuzustände zu charakterisieren (vgl. Kap. 5.5). Dies wird besonders deutlich an den Beispielen von PEARSON [59] [60], die einerseits die Möglichkeit von lokaler Absorption für Potentialstreuung zeigen, andererseits ein Modell mit „vernünftigem“ Potential darstellen, so daß H rein singulärstetiges Spektrum besitzt. Aus diesen Gründen fordert man zusätzliche Eigenschaften der Wellenoperatoren.

Wir folgen der Konvention in [62] Falls für jedes $\psi \in \mathcal{H}_{cont}(H)$ Zustände ψ_{\pm} existieren mit

$$\lim_{t \pm \infty} \|e^{-iHt}\psi - e^{-iH_0t}\psi_{\pm}\|, \quad (5.46)$$

spricht man von „starker asymptotischer Vollständigkeit“. Auf der Ebene der Wellenoperatoren bezeichnet man die zusätzlichen Forderungen zur Existenz $\text{ran}\Omega_{+} = \text{ran}\Omega_{-}$ als „schwache Vollständigkeit“, die ausreicht, um den unitären S -Operator $S := \Omega_{-}^{\dagger}\Omega_{+}$ zu definieren. Die Bedeutung des S -Operators für die Streutheorie wurde insbesondere von HEISENBERG [42] betont. Die stärkere Forderung $\text{ran}\Omega_{+} = \text{ran}\Omega_{-} = \mathcal{H}_{ac}$ wird als „Vollständigkeit“ bezeichnet. Falls zusätzlich noch $\mathcal{H}_{sc}(H) = \emptyset$, spricht man von „starker Vollständigkeit“. In diesem Fall ist $\text{ran}\Omega_{\pm} = \mathcal{H}_{cont}(H)$ und „starker Vollständigkeit“ ist damit äquivalent zur „starken asymptotischen Vollständigkeit“.

Wir verweisen auf folgendes Resultat:

Satz 5.13 ([62], S. 82)

Sei V relativ beschränkt zu H_0 mit relativer Schranke $a < 1$ und $\|V(H_0 - i)^{-1}P_{K_R^c}\| \in L^1(0, \infty)$. Dann gilt asymptotische Vollständigkeit, d.h. $\mathcal{H}_{sc}(H) = \emptyset$ und

$$\text{ran}\Omega_{\pm} = \mathcal{H}_{cont} = \mathcal{H}_{ac} \quad (5.47)$$

Eigenwerte können sich nur bei der Null häufen, und Eigenwerte ungleich Null haben endliche Vielfachheit

Der Satz wurde mit einer „neuen“ Beweistechnik – der „geometrischen Methode“ von ENSS [31] – bewiesen. Sie basiert auf der grundlegenden Arbeit von RUELLE [67] (siehe auch Kap. 5.5), in der erstmals spektrale Eigenschaften mit geometrischen Eigenschaften der Lokalisierung in Raum und Zeit verknüpft wurden. Damit war der „Bann der abstrakten Methoden“ gebrochen, die in der Arbeit von FADDEEV [32] zum Beweis der asymptotischen Vollständigkeit des 3-Teilchen-Problems noch voll ausgeführt sind, mit äußerst komplizierte Abschätzungen der Resolvente, deren Verallgemeinerung auf N -Teilchen-Probleme aussichtslos schien. Die ENSSsche Methode ermöglichte hingegen weitere Arbeiten zur asymptotischen Vollständigkeit von kurzreichweitigen N -Teilchenproblemen, so etwa die Arbeit von SIGAL und SOFFER [71], GRAF [35] und YAFAEV [77]. Die wohl umfassendste Erweiterung auf langreichweitige Potentiale stammt von DEREZIŃSKI [23].

Unsere Analyse und der Beweis des „Flux-across-Surfaces“-Satzes zeigen nun aber, daß die Ergebnisse zur asymptotischen Vollständigkeit noch zu schwach sind, um Streutheorie zu begründen.

5.7 Zur Methode von GREEN und LANFORD

In unserer Beweismethode spielte die Existenz einer Eigenfunktionsentwicklung eine große Rolle, während der Zusammenhang mit den Wellenoperatoren unwichtig war.

Eine verwandte Sichtweise kann man in der Methode von GREEN-LANFORD [36] erkennen³. Diese besteht darin, ausgehend von einer Eigenfunktionsentwicklung die Existenz und Vollständigkeit der Wellenoperatoren zu begründen. In [26] wird die Vorgehensweise folgendermaßen formuliert. Angenommen, eine Eigenfunktionsentwicklung $\phi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ (im Sinne unserer Definition 4.11) existiert. Dann gilt

$$\psi_t(\mathbf{x}) = (e^{-iHt}\psi)(\mathbf{x}) = e^{-iH_0t}\psi^\#(\mathbf{x}) + \beta(\mathbf{x}, t), \quad (5.48)$$

³In der Arbeit [36] wird unter anderem zum erstenmal ein „Scattering-into-Cones“-Satz formuliert, der dann später von DOLLARD aufgegriffen und wesentlich verallgemeinert wurde (siehe Satz 4.3)

wobei

$$\beta(\mathbf{x}, t) := -\frac{1}{2\pi} \int d^3k \left(\int d^3y \frac{e^{-ik^2t/2 - ik|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} V(\mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}, \mathbf{k}) \right) \psi^\#(\mathbf{k}). \quad (5.49)$$

Definiert man nun den Operator U_+ über $(\widehat{U_+ \psi})(\mathbf{k}) := \psi^\#(\mathbf{k})$, so ist dieser Operator gleich dem starken Limes von $e^{iH_0t} e^{-iHt}$ für $t \rightarrow \infty$, falls man zeigen kann, daß die L^2 -Norm von $\beta(\mathbf{x}, t)$ für $t \rightarrow \infty$ gegen Null strebt. Vertauscht man die Integrationsreihenfolge in 5.49, findet man

$$\|\beta(\mathbf{x}, t)\|_2 = \frac{1}{2\pi} \int d^3y |V(\mathbf{y})| \left\| \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \int d^3k e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{y}| - ik^2t/2} \phi(\mathbf{y}, \mathbf{k}) \psi^\#(\mathbf{k}) \right\|_2. \quad (5.50)$$

Mit der Substitution $\mathbf{r} := \mathbf{x} - \mathbf{y}$ findet man für das Quadrat der Norm in 5.49

$$4\pi \int_0^\infty dr \left| \int d^3k e^{-ikr - ik^2t/2} \phi(\mathbf{y}, \mathbf{k}) \psi^\#(\mathbf{k}) \right|^2. \quad (5.51)$$

Falls $\|\phi\|_\infty < \infty$, ergibt sich mit dem Theorem von PLANCHEREL, daß 5.51 durch eine Konstante unabhängig von \mathbf{y} und t beschränkt ist. Für jedes feste \mathbf{y} ist für Lösungen der freien SCHRÖDINGER-Gleichung bekannt (siehe Lemma 3 in XI.3 in REED-SIMON [66]), daß $\int_0^\infty dr \left| \int d^3k e^{-ikr - ik^2t/2} \phi(\mathbf{y}, \mathbf{k}) \psi^\#(\mathbf{k}) \right|^2$ für $t \rightarrow \infty$ gegen Null strebt. Für $V \in L^1(\mathbb{R}^3)$ folgt das Ergebnis mit LEBESGUES Theorem der dominierten Konvergenz.

Es sei an dieser Stelle bemerkt, daß für diese Methode lokale Beschränktheit von $\phi(\mathbf{x}, \mathbf{k})$, für $\mathbf{k} \in K \subset \mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ kompakt, ausreicht, denn man kann sich auf die dichte Menge von Wellenpaketen mit kompaktem Träger im \mathbf{k} -Raum ohne 0 beschränken (vgl. Bem. 4.12).

Das Verhalten von $\beta(\mathbf{x}, t)$ spielte auch in unserer Analyse eine zentrale Rolle, denn das Abfallverhalten von $\beta(\mathbf{x}, t)$ in x und t war wesentlich für den Beweis des „Flux-across-Surfaces“-Satzes. Für unsere Zwecke genügt nicht, daß $\lim_{t \rightarrow \infty} \|\beta(\cdot, t)\|_2 = 0$, sondern es müssen die Bedingungen von Lemma 4.16 bzw. die Bedingungen von Lemma 4.7 erfüllt sein, in denen das asymptotische Verhalten der Ströme kontrolliert wird.

5.8 Zur Ableitung des Impulsoperators und der HEISENBERGSchen Unschärferelation

In einem Streuexperiment wird in gewissem Sinn nur die Richtung der asymptotischen Geschwindigkeit gemessen, aber nicht deren Betrag. Es liegt aber eine instantane Meßmethode nahe, die unter anderem auch von FEYNMAN [34] S. 96ff als realistische Messung des Impulses propagiert wurde (siehe auch [75] S. 38f). Sei ψ eine Wellenfunktion, die sich gemäß $\psi_t = e^{-iH_0t} \psi$ entwickelt. Für die asymptotische Form von ψ_t gilt DOLLARDS Lemma 1.3:

$$\psi_t(\mathbf{x}) \rightarrow (it)^{-3/2} e^{i\frac{\pi}{2t}} \hat{\psi}\left(\frac{\mathbf{x}}{t}\right), \quad (5.52)$$

im Sinne, daß die L^2 -Differenz für $t \rightarrow \pm\infty$ gegen Null strebt.

Führen wir nun zur Zeit t eine instantane Ortsmessung durch. Das Ergebnis sei $\mathbf{x}(t)$. Im Grenzfall $t \rightarrow \infty$ strebt die statistische Verteilung von $\mathbf{x}(t)/t$ nach Lemma 1.3 gegen $|\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2$. Denn für meßbares $\Delta \subset \mathbb{R}^3$ gilt

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}(t)/t \in \Delta) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int d^3x |\psi_t(\mathbf{x})|^2 \chi_\Delta(\mathbf{x}/t) \\ &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int d^3x t^{-3} |\hat{\psi}(\mathbf{x}/t)|^2 \chi_\Delta(\mathbf{x}/t) \\ &= \int d^3p |\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2 \chi_\Delta(\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (5.53)$$

Dies ist nun eine Art zu präzisieren, was unter „Messung des Impulsoperators an einem System im Zustand ψ “ zu verstehen ist. Denn formal können wir nun den Impulsoperator $\hat{p} := \int d^3p p \mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|$ definieren, der die statistische Verteilung solcher skalierten Ortsmessungen asymptotisch in der üblichen quantenmechanischen Weise beschreibt.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P}^\psi(\mathbf{x}(t)/t \in \Delta) = \langle \psi | P_\Delta^{\hat{p}} | \psi \rangle = \int_\Delta d^3p |\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2 \quad (5.54)$$

In derselben Weise definieren wir den Ortsoperator $\hat{x} := \int d^3x x \mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|$, so daß auch gilt (nach der Quantengleichgewichtshypothese, bzw. der BORNschen Regel)

$$\mathbb{P}^\psi(\mathbf{x} \in \Delta) = \langle \psi | P_\Delta^{\hat{x}} | \psi \rangle = \int_\Delta d^3x |\psi(\mathbf{x})|^2. \quad (5.55)$$

Damit folgt natürlich insbesondere, daß $[\hat{x}, \hat{p}] = i$ (angewandt etwa auf $\psi \in \mathcal{S}$) und für die Varianzen $(\Delta \hat{p})^2 := \int d^3p |\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2 p^2 - (\int d^3p p \mathbf{p} |\hat{\psi}(\mathbf{p})|^2)^2$ und $(\Delta \hat{x})^2 := \int x^2 d^3x |\psi(\mathbf{x})|^2 - (\int d^3x x \mathbf{x} |\psi(\mathbf{x})|^2)^2$ die „Unschärferelation“ $\Delta \hat{p} \Delta \hat{x} \geq \frac{1}{2}$ gilt.

Man beachte, daß die Unschärferelation, die ja üblicherweise (vgl. Kap. 1.3) als Argument gegen die Existenz von Teilchenbahnen angesehen wird, sich als Konsequenz einer Theorie mit Teilchenbahnen darstellt.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit entwickeln wir Streutheorie aus der Sicht BOHMScher Mechanik, einer nicht-NEWTONschen Punktteilchenmechanik, in der die Wellenfunktion eines Systems, die sich gemäß der SCHRÖDINGER-Gleichung entwickelt, die Bewegung der Teilchen bestimmt. Die Orte der Teilchen eines Systems mit Wellenfunktion ψ sind $|\psi|^2$ -verteilt. Wir analysieren die statistische Verteilung der Trajektorienkreuzungen von glatten Oberflächen, die das Streuzentrum umschließen, durch Raum-Zeit-Integrale des Wahrscheinlichkeitsstroms. Wir geben eine Bedingung an (die „current-positivity-condition“ oder CPC), unter der die statistische Verteilung der Austrittsorte durch ein Positiv-Operator-wertiges-Maß (POV) gegeben ist. Die Verteilung ist im Prinzip experimentell überprüfbar. Der Operatorformalismus der Quantenmechanik kann für solche Streuexperimente keine Aussagen machen.

Für den speziellen Fall von Kugeloberflächen definieren wir das für die Streutheorie fundamentale Streuquerschnittsmaß als asymptotische Verteilung der Austrittsorte im Grenzfall großer Entfernungen. Wir beweisen den „Flux-across-Surfaces“-Satz, der uns eine Formel für das Streuquerschnittsmaß liefert, die mit der üblichen quantenmechanischen Formel übereinstimmt. Damit ist gezeigt, daß diese nur im Grenzfall großer Entfernungen anwendbar ist. Die Verteilung der Austrittsorte ist dabei durch ein Projektions-Operatorwertiges-Maß (PV) und damit durch einen selbstadjungierten Operator gegeben.

Mit dieser physikalischen und mathematischen Begründung der Streutheorie werfen wir Licht auf den Zusammenhang zwischen der zeitunabhängigen („naiven“) Streutheorie und der zeitabhängigen Streutheorie sowie auf die physikalische Relevanz der quantenmechanischen Konzepte der asymptotischen Vollständigkeit von Wellenoperatoren und der S -Matrix. Unsere Analyse der Streuvorgänge führt zu einer Reihe physikalisch bedeutsamer mathematischer Aufgaben, wie z.B. Beweis des „Flux-across-Surfaces“-Satzes für allgemeine Potentiale und Vielteilchensysteme oder der Ableitung der Formel für den asymptotischen Streuquerschnitt.

Das Beispiel „Streutheorie“ ist von allgemeiner Bedeutung, da die meisten Experimente „zur Messung einer Observablen“, z.B. des Impulsoperators, Streuexperimente sind. Operatoren (bis auf den HAMILTON-Operator), Beobachter und Meßapparate spielen in un-

serer Begründung der Streutheorie keine Rolle. Wir berechnen vielmehr die statistische Verteilung von Ergebnissen von Streuexperimenten aus einer Theorie und legen sie nicht axiomatisch durch Angabe eines Operators fest, ganz im Sinne des folgenden Zitats:

in physics the only observations we must consider are position observations, if only the position of instrument pointers. It is a great merit of the de Broglie-Bohm picture to force us to consider this fact. If you make axioms, rather than definitions and theorems, about 'measurements' of anything else, then you commit redundancy and risk inconsistency.

J S BELL [6] S 166

Zwei Dinge wollen wir ausdrücklich festhalten:

- Aus BOHMscher Mechanik kann der Operatorformalismus der Quantenmechanik als phänomenologische Beschreibung mikroskopischer Vorgänge abgeleitet werden, wobei die zugrundeliegenden Idealisierungen mathematisch präzise ansprechbar sind.
- BOHMsche Mechanik erlaubt es, die statistische Verteilung von Meßgrößen zu berechnen, die nicht durch einen selbstadjungierten Operator beschreibbar sind.

Deshalb gibt es keinen guten Grund, an den zentralen Dogmen der Standard-Quantenmechanik, nämlich daß die Wellenfunktion $\psi \in \mathcal{H}$ die vollständige Beschreibung eines quantenmechanischen Systems beinhaltet, und daß die quantenmechanischen Observablen die selbstadjungierten Operatoren auf dem HILBERT-Raum \mathcal{H} sind, weiter festzuhalten.

Danksagung

Ich danke Herrn Prof. Detlef Dürr für die Vergabe der Arbeit, die vielen wertvollen Diskussionen, das große persönliche Engagement und die Motivation, ohne die ich die teilweise langen Durststrecken nicht überwunden hätte. Herrn Prof. Sheldon Goldstein danke ich für die harte Lehre, den als richtig erkannten Weg unerbittlich zu verfolgen und insbesondere für die großen Hilfen, dabei auch durchzuhalten. Eine große Unterstützung erfuhr ich auch durch Herrn Prof. Nino Zanghí, durch den mir so mancher Irrweg erspart geblieben ist. Herrn Prof. Joel Lebowitz danke ich für seine Gastfreundschaft, durch die mir ein einjähriger Aufenthalt an der Rutgers-Universität ermöglicht wurde. Herr Prof. Herbert Spohn unterstützte mich mit kritischer Aufgeschlossenheit gegenüber der Thematik und der Vermittlung wichtiger Kontakte. Herrn Prof. Georg Süßmann bringe ich nach vielen Vorlesungen, Seminaren und Diskussionen Hochachtung und Dank entgegen. Herrn Prof. Hubert Kalf danke ich für seine freundliche Unterstützung und besonders für die wertvollen Hinweise auf wichtige Literatur. Ich danke Herrn Christian Lederer, Herrn Erwin Schörner, Herrn Dr. Jürgen Weckler und besonders Herrn Dr. Bernhard Lany-Weyda und Herrn Priv. Doz. Dr. Reinhard Lang für das sorgfältige Durchsehen des Manuskripts. Weiter bin ich dankbar für die aufschlußreichen Diskussionen, die ich unter anderem mit den Herren Prof. J. Dereziński, I. Soffer und D. Yafaev führen konnte. Karin Berndl, die einen ähnlich mühsamen Weg gegangen ist wie ich, danke ich für die oftmals nötige fachliche und moralische Unterstützung.

Dem Freistaat Bayern, dem DAAD und den Trägern des Graduiertenkollegs „Mathematik im Bereich ihrer Wechselwirkung mit der Physik“ bin ich für die finanzielle Unterstützung zu Dank verpflichtet.



Literaturverzeichnis

- [1] D. Albert, Bohm's alternative for quantum mechanics, *Scientific American*, Mai (1994).
- [2] G.R. Allcock, The time of arrival in quantum mechanics I-III, *Ann. of Phys.* **53**, 253 (1969).
- [3] W. Amrein, J. Jauch, und K. Sinha, *Scattering Theory in Quantum Mechanics*, Lecture Notes and Suppl. in Physics, W.A. Benjamin Inc., London-Amsterdam-Don Mills-Sydney-Tokyo (1977).
- [4] W. Amrein, V. Georgescu, Bound states and scattering states in quantum mechanics, *Helv. Phys. Acta* **46**, 635 (1973).
- [5] A. Aspect, Experiments on Einstein-Podolsky-Rosen-type correlations with pairs of visible photons, in *Quantum Concepts in Space and Time*, R. Penrose und C.J. Isham (Hrsg.), Oxford University Press (1986).
- [6] J S. Bell, *Speakable and Unsayable in Quantum Mechanics*, Cambridge University Press (1987).
- [7] J.S. Bell, Against measurement, *Phys. World* **3**, 33 (1990).
- [8] K. Berndl, Dissertation an der Ludwig-Maximilians-Universität München, eingereicht im Oktober 1994.
- [9] K Berndl, D. Dürr, S. Goldstein, und N. Zanghì, Self-adjointness and the existence of deterministic trajectories in quantum theory, in *Micro-, Meso-, and Macroscopic Approaches in Physics*, A Verbeure (Hrsg), NATO ASI series, Plenum, New York (1993).
- [10] W. Brenig, R. Haag, General quantum theory of collision processes, *Fortschr. d. Phys.* **7**, 183 (1959)

- [11] L. de Broglie, A tentative theory of light quanta, *Philos. Mag.* **47**, 446 (1924).
- [12] L. de Broglie, La nouvelle dynamique des quanta, in *Electrons et photons: Rapports et discussions du cinquième conseil de physique tenu a Bruxelles du 24 au 29 octobre 1927 sous les auspices de l'institut international de physique Solvay*, Gauthier-Villars, Paris (1928).
- [13] D. Bohm, A suggested interpretation of quantum theory in terms of hidden variables I+II, *Phys. Rev.* **85**, 166 (1952).
- [14] N. Bohr, Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete?, *Phys. Rev.* **48**, 496 (1935), abgedruckt in *Quantum Theory and Measurement*, J.A. Wheeler, W.H. Zurek (Hrsg.), Princeton series in physics, Princeton University Press, Princeton, New Jersey (1983).
- [15] M. Born, Quantenmechanik der Stoßvorgänge, *Z. f. Physik* **37**, 863 (1926).
- [16] M. Born, Quantenmechanik der Stoßvorgänge, *Z. f. Physik* **38**, 233 (1926).
- [17] J.-M. Combes, R.G. Newton, and R. Shtokhamer, Scattering into cones and flux across surfaces, *Phys. Rev. D* **11**, 366 (1975).
- [18] J M. Cook, Convergence of the Møller wave matrix, *J. Math. and Phys.* **36**, 82 (1957).
- [19] H.L. Cycon, R.G. Froese, W Kirsch, B. Simon, *Schrödinger Operators*, Springer Verlag (1987).
- [20] M. Daumer, D. Dürr, S. Goldstein, and N. Zanghí: On the role of operators in quantum theory, (in Vorbereitung).
- [21] M. Daumer, D. Dürr, S. Goldstein, und N. Zanghí, Scattering theory and the role of operators in Bohmian mechanics, erscheint in *Micro-, Meso-, and Macroscopic Approaches in Physics*, A. Verbeure (Hrsg.), NATO ASI series, Plenum, New York (1993).
- [22] D. Davies, *Quantum Theory of Open Systems*, Academic Press, London-New York-San Francisco (1976).
- [23] J. Dereziński, C. Gerard: *Asymptotic Completeness of N-particle Systems*, Preprint, Erwin Schrödinger International Institute for Mathematical Physics, ESI 60 (1993).
- [24] J.D. Dollard: Scattering into cones I, Potential scattering, *Comm. Math. Phys* **12**, 193 (1969).

- [25] J.D. Dollard. Scattering into cones II, N -body problems, *J Math. Phys.* **14**, 708 (1973)
- [26] J.D. Dollard, B. Bourgeois· Green and Lanford revisited, in *Mathematical Methods and Applications of Scattering Theory*, Lecture notes in physics **130**, Springer-Verlag (1980)
- [27] J.D. Dollard: On the definition of scattering subspaces in nonrelativistic quantum mechanics, *J. Math. Phys* **18**, 229 (1977)
- [28] J.D. Dollard, *J. Math. Phys.* **5**, 729 (1964)
- [29] D. Dürr, S. Goldstein, and N. Zanghí, Quantum equilibrium and the origin of absolute uncertainty, *J. Stat. Phys* , **67**, 843 (1992)
- [30] A. Einstein, M. Born, Briefwechsel 1916-1955, Rowohlt (1969).
- [31] V. Enss: Asymptotic completeness for quantum mechanical potential scattering, *Comm. Math. Phys.* **61**, 285 (1978).
- [32] L. Faddeev, Mathematical aspects of the three-body problem in quantum scattering theory, (Steklov Institute 1963), Israel Program for Scientific Translation (1965).
- [33] P. Feyerabend, *Wider den Methodenzwang*, Suhrkamp Taschenbuch Wissenschaft **597**, (1993⁴).
- [34] R.P. Feynman, A.R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York (1965).
- [35] G.M. Graf, Asymptotic completeness for N -body short-range quantum systems: a new proof, *Comm. Math. Phys.* **132**, 73 (1990).
- [36] T.A. Green, O.E. Lanford III, *J. Math. Phys.* **1**, 139 (1960).
- [37] M.L. Goldberger, K.M. Watson, *Collision Theory*, Wiley, New York (1964).
- [38] S. Goldstein, Stochastic mechanics and quantum theory, *J. Stat. Phys.* **47**, 645 (1987).
- [39] S. Goldstein, J.L. Lebowitz, Quantum mechanics: Does the wave function provide a complete description of physical reality?, in *The Physical Review: The first hundred years*, H.H. Stroke (Hrsg.), AIP Press (1994).

- [40] K. Gustafson: Candidates for σ_{ac} and H_{ac} , in *Scattering Theory in Mathematical Physics*, D. Reidel publishing company, Dordrecht-Holland (1974).
- [41] W. Heisenberg, Über die quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen, *Z f Physik* **33**, 879 (1925).
- [42] W. Heisenberg, Der mathematische Rahmen der Quantentheorie der Wellenfelder, *Z. f. Naturforschung* **1**, 608 (1946).
- [43] W. Heisenberg, *Physical Principles of the Quantum Theory*, Chicago (1930).
- [44] P. Holland, *The Quantum Theory of Motion*, Cambridge University Press (1993).
- [45] L. Hörmander, The existence of wave operators in scattering theory, *Math. Zeits* **146**, 69 (1976).
- [46] W. Hunziker, On the space-time behavior of Schrödinger wave functions, *J. Math. Phys.* **7**, 300 (1966).
- [47] T. Ikebe, Eigenfunction expansions associated with the Schrödinger operator and their application to scattering theory, *Arch. Rational Mech. Anal.* **5**, 1 (1960).
- [48] J.M. Jauch, Theory of the scattering operator, *Helv. Phys. Acta* **31**, 127 (1958).
- [49] T. Kato, Fundamental properties of Hamiltonian operators of Schrödinger type, *Trans. Am. Math. Soc.* **70**, 195 (1951).
- [50] T.S. Kuhn, Die Struktur wissenschaftlicher Revolutionen, Suhrkamp Taschenbuch Wissenschaft **25** (1991¹¹).
- [51] C.R. Leavens, Transmission, reflection and dwell times within Bohm's causal interpretation of quantum mechanics, *Solid State Comm.* **74**, 923 (1990).
- [52] B. Lippmann, J. Schwinger, Variational principles for scattering processes I, *Phys. Rev.* **79**, 469 (1950).
- [53] G. Ludwig, *Einführung in die Grundlagen der theoretischen Physik*, Band 3, Vieweg, Braunschweig (1976).
- [54] D. Mermin, Hidden variables and the two theorems of John Bell, *Rev. Mod Phys.* **65**, 803 (1993).
- [55] B. Misra and E.C.G. Sudarshan, The Zeno's paradox in quantum theory, *J. Math Phys.* **18**, 756 (1977).

- [56] C. Møller, *Kgl. Danske Videnskab. Selskab., Mat. -Fys. Medd.* **23**, 1 (1946).
- [57] J v. Neumann, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, Springer Verlag, Berlin, (1932).
- [58] R.G Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, Springer, New York (1982²).
- [59] D.B. Pearson, An example in potential scattering illustrating the breakdown of asymptotic completeness, *Comm. Math. Phys* **40**, 125 (1975).
- [60] D.B Pearson, General theory of potential scattering with absorption at local singularities, *Helv. Phys Acta* **48**, 639 (1975)
- [61] R. Penrose, *The Emperor's new Mind*, Oxford University Press, New York-Oxford (1989)
- [62] P.A. Perry, *Scattering Theory by the Enss Method*, Mathematical reports, Vol 1, Part 1, Harwood Academic Publishers, Amsterdam (1983).
- [63] T.J. Pinch, What does a proof do if it does not prove?, in *The Social Production of Scientific Knowledge*, Sociology of sciences, Vol. I, D. Reidl Publishing Company, Dordrecht-Holland (1977)
- [64] M Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics I*, Academic Press Inc., London (1980).
- [65] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics II*, Academic Press Inc., London (1975).
- [66] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics III*, Academic Press Inc., London (1979).
- [67] D. Ruelle, A remark on bound states in potential scattering theory, *Nuovo Cimento A* **61**, 655 (1969).
- [68] E. Schrödinger, Quantisierung als Eigenwertproblem, *Ann. Phys.* **79**, 361 (1926)
- [69] J, Schwartz, The pernicious influence of mathematics on science, in *Discrete Thoughts*, M. Kac, G.C Rota und J.T. Schwartz (Hrsg.), Birkhäuser Verlag, Boston (1986).
- [70] D. Shucker, Stochastic mechanics of systems with zero potential, *J. of Funct. Anal.* **38**, 146 (1980).

- [71] I.M. Sigal, A. Soffer, The N -particle scattering problem: asymptotic completeness for short-range systems, *Ann. Math.* **126**, 35 (1987).
- [72] B. Simon, *Quantum Mechanics for Hamiltonians defined as Quadratic Forms*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey (1971).
- [73] K.B. Sinha, On the absolutely and singular continuous subspace in scattering theory, *Ann. Inst. H. Poincaré*, Vol. XXVI, **3**, 263 (1977).
- [74] A. Sirjaev, *Wahrscheinlichkeitstheorie*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin (1988).
- [75] G. Süßmann, *Einführung in die Quantenmechanik*, Band 1, Bib. Insitut Mannheim (1962).
- [76] E.H. Wichman, Scattering of wave-packets, *Am. J. of Phys.* **33**, 20 (1965).
- [77] D.R. Yafaev, On solutions of the Schrödinger equation with radiation conditions at infinity, *Adv. Soviet. Math.* **7**, 179 (1991).