Februar 2004

Eine geometrische Phase rettete Sommerfelds Theorie der Feinstruktur

Stefan Keppeler
Matematisk Fysik, LTH, Lunds Universitet, Box 118, 22100 Lund, Sweden
stefan.keppeler@matfys.lth.se

Im Jahr 1916 berechnete Sommerfeld die Feinstruktur der Spektrallinien des Wasserstoffatoms mit den Methoden der "alten" Quantentheorie. Ein wesentlicher Beitrag zur Feinstruktur rührt von der Spin-Bahn-Wechselwirkung her, ein Effekt den Sommerfeld nicht berücksichtigen konnte, da der Spin des Elektrons erst neun Jahre später entdeckt wurde. Die Frage, warum er dennoch die korrekte Formel für die Energieniveaus des Wasserstoffatoms erhielt, hat eine verblüffende Antwort, bei der eine geometrische Phase – die von einer klassischen Präzessionsgleichung herrührt – eine entscheidende Rolle spielt.

Im Bohrschen Atommodell bewegt sich das Elektron um den Kern, wie ein Planet um die Sonne. Bohr postulierte, daß das Elektron nur auf bestimmten Kreis-Bahnen strahlungsfrei umlaufen kann. Sommerfeld [1] verallgemeinerte dieses Modell, indem er nicht nur Kreisbahnen sondern beliebige Kepler-Ellipsen zuließ. Um auch die Feinstruktur der Spektrallinien zu verstehen, erweiterte er die Theorie außerdem dahingehend, daß er die Bewegung des Elektrons nicht mehr mit der Newtonschen Mechanik sondern relativistisch beschrieb, d.h. er quantisierte sogenannte Rosettenbahnen, relativistische Kepler-Ellipsen mit fortschreitendem Perihel. Verblüffenderweise wurde Sommerfelds so erzielte Feinstrukturformel über zehn Jahre später identisch mithilfe der Dirac-Gleichung, der relativistischen Wellengleichung für ein Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$, hergeleitet. Einen Überblick über die "alte" Quantentheorie geben neben Sommerfelds Lehrbuch *Atombau und Spektrallinien* [2] z.B. auch Yourgrau und Mandelstam in §10 ihrer Monographie [3]. Am Ende dieses Kapitels kommen sie, allein durch Betrachtung der Feinstrukturformel, zu folgendem Schluß: *"Sommerfeld's explanation was successful because the neglect of wave mechanics and the neglect of spin by chance cancel each other in the case of the hydrogen atom."*

Um die Frage zu beantworten, ob dies tatsächlich die Lösung des Sommerfeld-Rätsels ist, ist es notwendig, sich zunächst die Situation um 1915 vor Augen zu führen. Das zwei Jahre zuvor publizierte Bohrsche Atommodell hatte durch die Herleitung der Balmer-Formel[1]und der Rydberg-Konstante beachtliche Erfolge erzielt, war aber bei weitem noch nicht allgemein anerkannt [4]. Die Quantisierungsvorschrift

$$S = \oint p \, \mathrm{d}x \stackrel{!}{=} 2\pi\hbar n \,, \qquad (1)$$

bei der die Wirkung S, das Integral des Impulses p entlang eines geschlossenen Weges im Konfigurationsraum (x bezeichnet den Ort), nur ein ganzzahliges Vielfaches n des Planckschen Wirkungsquantums $h = 2\pi\hbar$ sein kann, war ad hoc auf die klassische Mechanik aufgesetzt. Verschiedene spektroskopische Fragen, wie die Aufspaltung der Spektrallinien in einem elektrischen Feld (Stark-Effekt), waren noch nicht verstanden, und über die allgemeine Formulierung der Quantisierungsvorschrift(en) für mehrere Freiheitsgrade bestand noch kein Konsens.

Abbildung 1: Die Väter der "alten" Quantentheorie: Arnold Sommerfeld (links) und Niels Bohr im Jahr 1919.

Quantisierung mehrerer Freiheitsgrade

Arnold Sommerfelds ab Ende 1915 veröffentlichten Arbeiten zur Atomtheorie setzten an mehreren dieser kritischen Punkte an und waren mitverantwortlich für den Durchbruch des Bohrschen Modells.

Einerseits führte Sommerfelds Quantisierung von Kepler-Ellipsen nicht nur, wie Bohrs Behandlung kreisförmiger Bahnen, zur korrekten Rydberg Formel für die Energieniveaus des Wasserstoffatoms und damit zu einer Herleitung der Balmer-Serie, sondern lieferte auch zusätzlich eine hohe Entartung der einzelnen Niveaus. Daß die Aufhebung dieser Entartung in äußeren Feldern zu einer Aufspaltung der Spektrallinien führen könnte,

[1] Bereits 1885 hatte Balmer eine empirische Formel angegeben, welche die vier Linien im sichtbaren Bereich des Wasserstoff-Bogensprektrums beschreibt und zu einer Serie ergänzt. Im Bohrschen Atommodell wird diese Balmer-Serie durch Übergänge des Elektrons aus höher angeregten Zuständen in den Zustand mit Hauptquantenzahl 2 erklärt

war auch ohne die explizite Durchführung dieser Rechnung bereits plausibel.

Andererseits erwies sich auch Sommerfelds pragmatischer Standpunkt zur Quantisierung von Systemen mit mehreren Freiheitsgraden als sehr erfolgreich. Ähnlich wie Epstein und Schwarzschild (und unabhängig von diesen auch Wilson) favorisierte er folgende Vorschrift: Sind die Bewegungsgleichungen des zu quantisierenden Systems separierbar, so wähle man zunächst dasjenige Koordinatensystem, in dem dies der Fall ist. Weiter postulierte er für jedes Paar (x_j, p_j) kanonisch konjugierter Koordinaten und Impulse eine Quantisierungsregel der Form (1), d.h.

$$\oint p_j \, \mathrm{d}x_j \stackrel{!}{=} 2\pi\hbar n_j \,, \tag{2}$$

mit ganzen (Quanten-)Zahlen n_j.

Betrachtet man die ausführliche Diskussion dieser erweiterten Bohrschen Regeln in den Abschnitten I.§1, I.§8 und I.§10 von [1], so erkennt man, daß diese Lösung damals nicht als die einzig mögliche galt. Wohl auch deshalb sind die Gleichungen (2) heute als die Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsregeln bekannt.

Obwohl sich der Sommerfeldsche Standpunkt als praktikabel und erfolgreich erwies, ist nicht von vornherein klar, inwieweit diese Vorgehensweise eindeutig ist bzw. welche Rolle die Wahl eines speziellen Koordinatensystems spielt.

Einen Schritt weiter in dieser Frage gelangt man, wenn man die Verbindung zur Hamilton-Jacobischen Theorie herstellt, was zuerst Schwarzschild tat. In integrablen mechanischen Systemen[2] können stets die damals v.a. in der Himmelsmechanik verwendeten Winkel- und Wirkungsvariablen eingeführt werden. In diesen Koordinaten hängt die Hamiltonfunktion H des Systems nur von den Wirkungsvariablen I_j, nicht aber von den Winkeln ab, d.h. $H = H(\boldsymbol{I})$. Die Wirkungsvariablen aber sind gerade durch die Integrale (2) dividiert durch 2π gegeben, d.h. in dieser Formulierung bestimmen sich die Energieniveaus nach Bohr-Sommerfeld direkt zu $E_{\boldsymbol{n}} = H(\hbar\boldsymbol{n})$. Ein wichtiger Vorteil dieser Formulierung war, daß damit der gesamte Apparat der himmelsmechanischen Störungstheorie für die Quantentheorie nutzbar gemacht wurde, was beispielsweise zum Verständnis des Stark-Effekts führte.

Den expliziten Beweis der Koordinatenunabhängigkeit der Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsregeln erbrachte Einstein 1917 [5]. Er betonte als erster in diesem Zusammenhang den geometrischen Aspekt der Phasenraumintegrabilität: Bei einem integrablen System mit d Freiheitsgraden fixiert die Anfangsbedingung für jede Trajektorie eine d-dimensionale Untermannigfaltigkeit des ($2d$-dimensionalen) Phasenraums, welche nicht verlassen werden kann. Diese ist, topologisch gesehen, durch einen Torus gegeben, siehe Abb. 2. Weiter ist auf diesem die Integration von $\boldsymbol{p}\mathrm{d}\boldsymbol{x}$ (die Summe aller $p_j \mathrm{d}x_j$, die in (2) noch einzeln auftauchten) wegunabhängig. In den Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsbedingungen (2) können dann die Integrale als Wegintegrale entlang elementarer Zyklen auf diesem Torus geschrieben werden (z.B. $\mathcal{C}_1$ und $\mathcal{C}_2$ in Abb. 2), d.h.

$$\oint_{\mathcal{C}_j} \boldsymbol{p} \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} \stackrel{!}{=} 2\pi\hbar n_j \,. \tag{3}$$

Diese Formulierung der Quantisierungsbedingungen ist nicht nur die eleganteste sondern auch die allgemeinste: Jedes klassisch integrable System kann auf diese Weise quantisiert werden. Für Situationen, in denen klassische Integrabilität nicht gegeben ist (z.B. für Systeme, die wir heute als chaotisch bezeichnen), läßt sich die Bohr-Sommerfeldsche Quantenmechanik jedoch nicht direkt erweitern. Aufgrund dieser bereits 1917 von Einstein gemachten Feststellung wird die Arbeit [5] gelegentlich als die "erste Arbeit zur Theorie des Quantenchaos" bezeichnet.

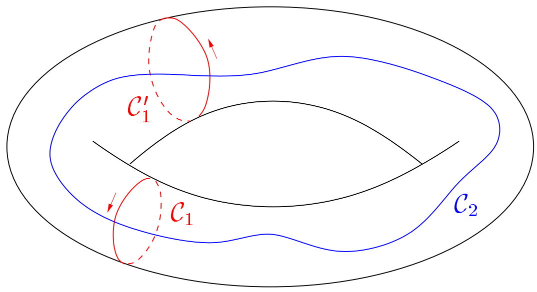

Abbildung 2: Fixiert man bei einem integrablen System mit d Freiheitsgraden die Werte aller d Erhaltungsgrößen, so definiert dies eine d-dimensionale Hyperfläche im ($2d$-dimensionalen) Phasenraum, welche die Topologie eines Torus hat, hier veranschaulicht durch einen 2-dimensionalen Torus. Das Integral von $\boldsymbol{p}\mathrm{d}\boldsymbol{x}$ ändert sich (wie bei einem konservativen Kraftfeld) nicht, wenn der Integrationsweg auf dem Torus deformiert wird. Dennoch ist die Integration entlang geschlossener Wege nicht notwendigerweise gleich Null, da nicht alle solchen Wege auf einen Punkt zusammengezogen werden können. Beispielsweise ergibt die Integration entlang von $\mathcal{C}_1$ denselben (i.a. nicht verschwindenden) Wert wie die Integration entlang $\mathcal{C}_1'$, wohingegen die Integration längs $\mathcal{C}_2$ i.a. einen anderen Wert ergibt.

WKB: Kurzwellenasymptotik verknüpft alte und neue Theorie

Schon bald nach der Ablösung der "alten" Quantentheorie durch die Matrizen- und Wellenmechanik wurden die Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsbedingungen als Grenzfall der neuen Theorie abgeleitet. Diese Arbeiten sind mit den Namen Wentzel, Kramers und Brillouin

[2] Integrable Systeme sind solche, bei denen ebensoviele Erhaltungsgrößen wie Feiheitsgrade existieren, wobei die Poissonklammern der Erhaltungsgrößen paarweise verschwinden. Separiebarkeit (s.o.) impliziert Integrabilität.

(WKB) verknüpft (gelegentlich ergänzt um ein “J” für die Beiträge Jeffreys).

Gemäß dem Bohrschen Korrespondenzprinzip müssen sich quantenmechanische Ergebnisse im Limes großer Quantenzahlen denen der klassischen Mechanik annähern. Heutzutage wird dieser Zusammenhang üblicherweise als Asymptotik im sogenannten semiklassischen Limes $\hbar \to 0$ verstanden. Die Grundidee der WKB-Methode ist nun, die Schrödingersche Wellenfunktion als das Produkt einer im semiklassischen Limes schnell oszillierenden Funktion $\exp(\frac{i}{\hbar}S)$ mit einem langsam veränderlichen Vorfaktor darzustellen, d.h.

$$\psi_{\mathrm{WKB}}(\boldsymbol{x}) = a(\boldsymbol{x}) \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(\boldsymbol{x})\right) . \tag{4}$$

Technisch handelt es sich daher um eine Kurzwellenasymptotik (d.h. eine singuläre Störungstheorie in $\hbar$), die z.B. bereits aus der Optik bekannt war, wo sie gleichermaßen den Übergang von der Maxwellschen Theorie zur Näherung der geometrischen Optik beschreibt.

Setzt man den Ansatz (4) in die Schrödingergleichung ein, und sortiert alle Terme nach Potenzen von $\hbar$, so findet man in führender Ordnung stets eine Hamilton-Jacobi-Gleichung für die Phasenfunktion S. Diese ist

Reflexionsphasen und Maslov-Index

Bei der Wellenausbreitung können aus unterschiedlichen Gründen Phasensprünge auftreten. Insbesondere muß das Verhalten bei Reflexionen gesondert untersucht werden. Betrachtet man, wie im Bohrschen Atommodell oder bei der WKB-Methode, stehende Wellen entlang geschlossener Wege, so wirken sich diese Phasensprünge direkt auf die Resonanz- bzw. Quantisierungsbedingungen aus. In vereinfachter Weise läßt sich dieses Verhalten bereits anhand der Reflexion von Seilwellen studieren.

Breitet sich eine Störung auf einem Seil aus und gelangt an ein offenes Ende (Abb. 3), so folgt auch der Endpunkt der Auslenkung und erzeugt auf diese Weise eine rücklaufende Störung, deren Auslenkung in die dieselbe Richtung geht, wie bei der einlaufenden Störung – die Welle wird ohne Phasenverschiebung reflektiert. Wird hingegen das Ende festgehalten (Abb. 4), so kann der Endpunkt der Auslenkung nicht folgen und die Auslenkung der rücklaufenden Störung ist derjenigen der einlaufenden entgegengesetzt – für eine Sinuswelle bedeutet das eine Phasenverschiebung um π.

Ähnlich verhält es sich mit einem quantenmechanischen Teilchen im Kasten, beschrieben durch eine Wellenfunktion ψ. Fordert man Neumannsche Randbedingungen (d.h. die Ableitung ψ' verschwindet am Rand), so wird eine einlaufende Welle ohne Phasenverschiebung reflektiert. Dirichletsche Randbedingungen (die Wellenfunktion ψ selbst verschwindet am Rand) dagegen entsprechen dem festgehaltenen Ende und es tritt eine Phasenverschiebung von π auf. Dazwischen liegt der Fall einer “weichen” Reflexion, d.h. das Teilchen wird nicht durch harte Wände sondern durch ein zum Rand hin stetig ansteigendes Potential eingeschränkt. In diesem Fall kann man zeigen, daß die Welle, nachdem sie bis zum klassischen Umkehrpunkt stetig abgebremst wurde, stets mit einer Phasenverschiebung von $\frac{\pi}{2}$ reflektiert wird.

Für eine periodische eindimensionale Bewegung ist die Anzahl der Umkehrpunkte gleich dem sogenannten Maslov-Index der zugehörigen Trajektorie im Phasenraum. Dieser Begriff läßt sich auf den mehrdimensionalen Fall verallgemeinern, so daß jeder geschlossenen Kurve $\mathcal{C}_j$ (vgl. auch Abb. 2) ihr Maslov-Index μ_j zugeordnet werden.

Betrachten wir nun, wie bei der EBK-Quantisierung (nach Einstein, Brillouin und Keller, siehe (5)), stehende Wellen, so beeinflussen die Phasenverschiebungen die Resonanz- bzw. Quantisierungsbedingungen. Bei einem Resonator der Länge L mit zwei festgehaltenen Enden lautet die Resonanzbedingung (bei einer Wellenlänge λ) $L = n\,\lambda/2$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ und damit gilt für die Resonanzfrequenzen $\nu_n = \frac{c}{2L}\,n$ (mit Ausbreitungsgeschwindigkeit c). Hält man hingegen nur ein Ende fest und läßt das andere offen, so gilt entsprechend $L = (2n+1)\,\lambda/4$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ bzw. $\nu_n = \frac{c}{2L}\,(n + \frac{1}{2})$. Ähnlich bewirkt jeder Phasensprung an einem klassischen Umkehrpunkt eine Verschiebung der Quantenzahlen um $\frac{1}{4}$, vgl. (5).

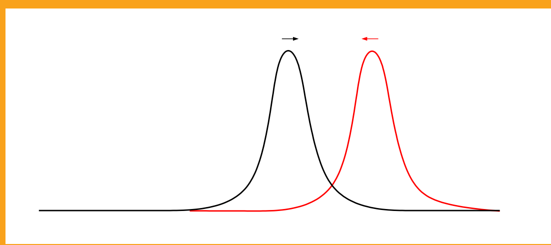

Abbildung 3: Reflexion einer Seilwelle an einem offenen Ende.

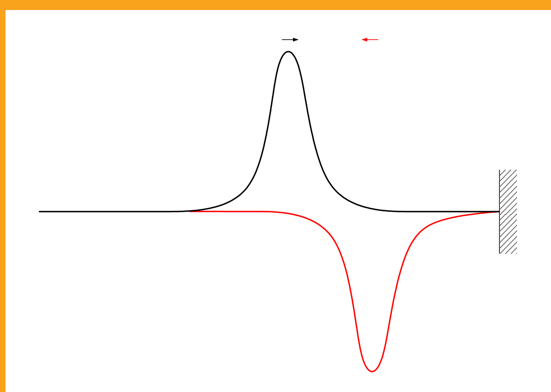

Abbildung 4: Reflexion einer Seilwelle an einem festgehaltenen Ende.

daher durch die klassische Wirkungsfunktion gegeben, welche sich für integrable Systeme als Linearkombination der bereits oben eingeführten Wirkungsvariablen darstellen läßt. Die Forderung der Eindeutigkeit der Wellenfunktion an jedem Punkt $\boldsymbol{x}$ im Konfigurationsraum hat dann (korrigierte) Bohr-Sommerfeld Quantisierungsbedingungen zur Folge.

Eine kleine, aber wichtige Modifikation tritt dadurch auf, daß die WKB-Wellenfunktion an verschiedenen Stellen Phasenverschiebungen erfährt. Dies ist ein allgemeines Phänomen, welches bei der Ausbreitung von Wellen jeglicher Art auftritt, siehe Detailkasten. Besonders einfach ist die Situation im eindimensionalen Fall: Hier tritt jedesmal eine Phasenverschiebung um $\pi/2$ auf, wenn die zugrundeliegende klassische Bewegung einen Umkehrpunkt passiert. In den Quantisierungsbedingungen schlägt sich jede dieser Phasenänderungen als Verschiebung der Quantenzahlen um $\frac{1}{4}$ nieder. Dies ist semiklassisch der Ursprung der Nullpunktsenergie $\hbar\omega/2$ bei den Energieeigenwerten $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ eines harmonischen Oszillators mit Frequenz ω (Verschiebung der Quantenzahlen um $\frac{1}{2}$, da es sich um eine Bewegung zwischen zwei Umkehrpunkten handelt).

Die Entwicklung zur allgemeinen Formulierung der korrigierten Quantisierungsbedingungen verlief in ähnlichen Schritten, wie zuvor in der "alten" Quantentheorie: Obwohl der eindimensionale Fall, sowie die Quantisierung einzelner Freiheitsgrade in separablen Systemen längst verstanden war, wurde die allgemeine geometrische und koordinatenunabhänge Formulierung erst 1958 von Keller angegeben (siehe dazu z.B. Kellers Übersichtsartikel [6]). Nach Keller schreiben wir daher die modifizierten Bohr-Sommerfeldschen Quantisierungsregeln in der Form

$$\oint_{\mathcal{C}_j} \boldsymbol{p}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} \stackrel{!}{=} 2\pi\hbar\left(n_j + \frac{\mu_j}{4}\right) . \tag{5}$$

Dabei ist die einzige neue Größe der (ganzzahlige) Maslovindex μ_j des Zykels $\mathcal{C}_j$ (vgl. Detailkasten). Entsprechend den verschiedenen Beiträgen auf dem Weg zu diesen allgemeinen Bedingungen wird (5) häufig EBK-Quantisierung (nach Einstein, Brillouin und Keller) oder, auf den geometrischen Hintergrund verweisend, schlicht Torus-Quantisierung genannt.

Bereits an dieser Stelle sind wir nun in der Lage, eine Vorstufe der eingangs gestellten Frage zu beantworten: Da die EBK-Bedingungen (5) nicht identisch mit den Bohr-Sommerfeld-Regeln (3) sind, kann man sich auch hier fragen, warum die Bohrsche Theorie die Rydberg-Formel bereits vollständig beschreibt und durch die Schrödingersche Wellenmechanik keinerlei Korrektur der Eigenwerte erfuhr. Die Antwort ist teilweise in der zweifachen (klassischen) Entartung der zugrundeliegenden Kepler-Bewegung zu suchen: Obwohl es sich um ein Problem mit drei Freiheitsgraden handelt, tritt nur eine einzige Frequenz auf. Bohrs Quantisierung kreisförmiger Kepler-Bahnen kommt einer Quantisierung der, dieser Frequenz zugeordneten, Wirkungsvariablen $I_1 = \hbar n$ mit (Haupt-)Quantenzahl $n = 1, 2, 3, \ldots$ gleich. Führt man die Wirkungsvariablen I_r für die radiale Wirkung und L für den Betrag des Drehimpulses ein, so ist die Hamiltonfunktion des Kepler-Problems eine Funktion der Summe $I_r + L = I_1$. Sommerfeld quantisierte gemäß (2) die Radialwirkung zu $I_r = \hbar n_r$ mit $n_r = 0, 1, 2, \ldots$ sowie den Drehimpuls zu $L = \hbar l$, $l = 1, 2, 3, \ldots$ [1]. Den Fall $l = 0$ schloß er aus, da die entsprechende Bahn das Elektron durch den Kern führen würde, was physikalisch unsinnig schien. Im Rahmen der EBK-Quantisierung findet man für jeden der beiden Freiheitsgrade einen Maslovindex von 2 (Bewegungen zwischen zwei Umkehrpunkten) und damit eine Verschiebung beider Quantisierungsregeln um $\frac{1}{2}$. Für beide Quantenzahlen gilt nun allerdings $n_r, l = 0, 1, 2, \ldots$ (grob gesprochen ist $l = 0$ jetzt deshalb erlaubt, weil dann mit $L = \hbar/2$ der Drehimpuls selbst nicht mehr verschwindet), so daß die Summe $I_r + L = \hbar(n_r + l + 1)$ dieselben Werte annimmt wie zuvor sowohl bei Bohr als auch bei Sommerfeld!

Bevor wir uns in gleicher Weise unserer eigentlichen Frage nach der Ursache der exakten Gültigkeit der Feinstrukturformel zuwenden können, sind noch Abstecher zur Gutzwillerschen Spurformel und zu Berrys geometrischer Phase notwendig.

Die Gutzwillersche Spurformel: Auch chaotische Systeme werden semiklassisch quantisiert

Ab Anfang der 70er Jahre erlangten semiklassische Methoden vor allem durch die Arbeiten Martin Gutzwillers neue Popularität, siehe z.B. [7, 8]. Anstatt explizite Quantisierungsregeln wie (2) oder (5) herzuleiten, untersuchte Gutzwiller die quantenmechanische Zustandsdichte semiklassisch, für die er die heute nach ihm benannte Gutzwillersche Spurformel herleitete. Die einzelnen Energieniveaus lassen sich dann zwar meist nur noch numerisch aus dem semiklassischen Ausdruck bestimmen, aber bei diesem Zugang fällt die Integrabilitätsbedingung weg: Chaotische Systeme lassen sich ebenso wie integrable oder solche mit gemischt regulärer und chaotischer Dynamik durch eine Spurformel beschreiben. Bei integrablen Systemen stellt man außerdem fest, daß die Spurformel äquivalent zur EBK-Quantisierung (5) ist. Bei der Herleitung war ein wichtiger Beitrag Gutzwillers, auch in diesem Kontext die Maslov-Phasen korrekt zu berücksichtigen.

Gutzwillers Arbeiten und verwandte Zugänge eröffneten semiklassischen Methoden einerseits neue Anwendungsgebiete (wie z.B. das Quantenchaos, die Physik mesoskopischer Systeme, oder spezielle Fragen in der Atom- und Kernphysik [9, 10, 11, 12], um nur exemplarisch einige Beispiele zu nennen) und trieben andererseits die Weiterentwicklung und Verfeinerung semiklassischer Methoden selbst an.

Klassische Spinpräzession in der Semiklassik

Um bei der Torus-Quantisierung auch relativistische Effekte und v.a. den Elektronenspin berücksichtigen zu können, ist es notwendig von der Dirac-Gleichung (anstatt der Schrödingergleichung) auszugehen. Eine solche Verallgemeinerung des WKB-Zugangs wurde erstmals 1932 von Pauli durchgeführt [15]. Er fand, mithilfe eines Ansatzes der Form (4) – wobei die Amplitude $a(\boldsymbol{x})$ nun ein 4-komponentiger Spinor ist – daß die Phase $S(\boldsymbol{x})$ der Wellenfunktion ebenfalls eine Hamilton-Jacobi-Gleichung erfüllt. Dabei tritt nun allerdings die Hamiltonfunktion für ein relativistisches Teilchen auf. Dieser Zugang wurde 1963 von Rubinow und Keller weiterentwickelt [16]: Sie zeigten, daß man aus den Bestimmungsgleichungen für den spinorwertigen Vorfaktor $a(\boldsymbol{x})$ eine klassische Spin-Präzessionsgleichung, die Thomas-Gleichung, herleiten kann. Somit erhält das Vektormodell, das Bild eines klassischen Spinvektors konstanter Länge, der entlang von Teilchenbahnen präzediert, in diesem Kontext eine rigorose Begründung. Die Amplitude $a(\boldsymbol{x})$ der WKB-Wellenfunktion kann dann mithilfe der Lösungen dieser Präzessionsgleichung entlang relativistischer Bahnen berechnet werden.

Obwohl damit seit langem explizite semiklassische Wellenfunktionen zur Verfügung standen, war eine direkte Verallgemeinerung der EBK-Quantisierung (5) nicht unmittelbar möglich. Das entscheidende Problem hierbei ist, daß die semiklassische Wellenfunktion, z.B. verfolgt entlang eines Weges auf einem Torus im Phasenraum (vgl. Abb. 2), nicht nur eine Phasenänderung erfährt, sondern daß der spinorwertige Vorfaktor "gedreht" wird. (Präziser ausgedrückt wirken auf ihn unitäre Transformationen, erzeugt durch SU(2)-Matrizen, die die Spindynamik widerspiegeln.) Die Eindeutigkeit der Wellenfunktion kann daher nicht mehr durch eine einfache Phasenbedingung garantiert werden. Es ist im Gegenteil sogar so, daß i.a. keine eindeutige Wellenfunktion, assoziiert mit einem Torus im Phasenraum, konstruiert werden kann, wenn die Spindynamik nicht zusätzlichen Bedingungen genügt.

Technisch einfacher läßt sich der Spinbeitrag in Spurformeln fassen, wobei die zugrundeliegende kombinierte

Die Berry-Phase

Werden bei einem Quantensystem externe Parameter variiert, d.h. wir betrachten einen effektiv zeitabhängigen Hamiltonoperator $\hat{H}(t)$, so treten in den Lösungen der Schrödingergleichung zusätzliche Phasenfaktoren auf. Konkret suchen wir eine Lösung von

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle\,, \tag{6}$$

wobei die Diracsche Bracket-Schreibweise verwendet wurde. Seien $|\varphi_n(t)\rangle$ und $E_n(t)$ instantane Eigenzustände und Eigenwerte, d.h.

$$\hat{H}(t)|\varphi_n(t)\rangle = E_n(t)|\varphi_n(t)\rangle\,, \tag{7}$$

mit $\langle\varphi_m(t)|\varphi_n(t)\rangle = \delta_{mn}$. Sucht man nun nach einer Lösung von (6), so überzeugt man sich leicht, daß der naive Ansatz $|\psi_n(t)\rangle = \exp(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int^t E_n(\tau)\,\mathrm{d}\tau)|\varphi_n\rangle$ die zeitabhängige Schrödingergleichung nicht erfüllt. Macht man stattdessen einen Ansatz mit einer zusätzlichen Phase $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma_n}$,

$$|\psi_n(t)\rangle = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int^t E_n(\tau)\,\mathrm{d}\tau - \mathrm{i}\gamma_n\right)|\varphi_n(t)\rangle\,, \tag{8}$$

so erhält man nach kurzer Rechnung die Gleichung

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\varphi_n(t)\rangle + \frac{\mathrm{d}\gamma_n}{\mathrm{d}t}|\varphi_n(t)\rangle = 0\,. \tag{9}$$

Multiplikation mit $\langle\varphi_n|$ von links, ergibt die Konsistenzbedingung

$$\frac{\mathrm{d}\gamma_n}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}\,\langle\varphi_n(t)|\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\varphi_n(t)\rangle\,, \tag{10}$$

welche direkt integriert werden kann. Man kann zeigen, daß das Ergebnis dieser Integration entlang eines geschlossenen Weges (d.h. wenn $\hat{H}(t)$ periodisch ist) nicht von der Geschwindigkeit abhängt, mit der der Weg durchlaufen wird (d.h. Reskalieren der Zeit t in (6) ändert γ_n nicht). Daraus leitet sich die Bezeichnung geometrische Phase für γ_n ab; meist wird sie jedoch nach [13] Berry-Phase genannt.

Eine notwendige Voraussetzung dafür, daß das so gefundene $|\psi(t)\rangle$ tatsächlich die Schrödingergleichung (6) löst, ist die Annahme einer adiabatischen Zeitentwicklung. Ähnliche Ausdrücke lassen sich jedoch auch für nicht-adiabtische Vorgänge herleiten. Eine weitere Komplikation tritt auf, wenn der Eigenwert $E_n(t)$ entartet ist. Dann müssen alle zugehörigen Eigenfunktionen simultan berücksichtigt werden, und der Phasenfaktor $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_n}$ wird zu einer unitären Matrix. Da die entsprechenden Ausdrücke auf der rechten Seite von (10) dann für verschiedenen Zeiten i.a. nicht mehr vertauschen (als Ergebnis ergibt sich ein pfadgeordnetes Integral) spricht man von einer nicht-abelschen geometrischen oder Berry-Phase. Eine solche, in beiderlei Hinsicht verallgemeinerte, Berry-Phase tritt bei der semiklassischen Behandlung von Teilchen mit Spin auf. Das Auftreten geometrischer Phasen in der Semiklassik wird allgemein in [14] diskutiert.

relativistische Teilchen- und Spin-Dynamik sowie insbesondere deren geometrische Aspekte zum Vorschein kommen [17, 18]: Das klassische Gegenstück zur Quantendynamik eines Teilchens mit Spin ist nicht durch einen Hamiltonschen Fluß (d.h. durch Bewegungsgleichungen, die aus einer Hamiltonfunktion abgeleitet werden können) gegeben, sondern durch eine kombinierte Dynamik, ein sogenanntes Schiefprodukt, auf dem Produkt des Phasenraums und der Sphäre (welche den Phasenraum des Spins darstellt). Für semiklassische Wellenfunktionen bedeutet dies, daß der Spinbeitrag als nicht-abelsche Berry-Phase (siehe Detailkasten) aufgefaßt werden kann. Zur Rolle des Spinbeitrags in Spurformeln siehe z.B. auch [19, 20].

Mithilfe dieser Informationen läßt sich auch die WKB-artige Behandlung der Dirac-Gleichung fortsetzen, und geometrisch erhält man das folgende Bild [21, 18]: An jedem Punkt eines Torus im Phasenraum (siehe Abb. 2) muß zunächst eine Späre, der Phasenraum der klassischen Spinpräzession, "angeheftet" werden. Für integrable Schiefprodukte kann an jeder Stelle des Torus eine ausgezeichnete Richtung im Spin-Phasenraum, die grüne Achse in Abb. 5, angegeben werden. Der Winkel zwischen dem Spinvektor $\boldsymbol{s}$ und dieser Achse ist eine Erhaltungsgröße, d.h. die Breitenkreise bezüglich der ausgezeichneten Richtung sind invariant. Kehrt man auf einem geschlossenen Weg zum selben Punkt auf dem Torus zurück, so kann der Spinvektor lediglich um einen Winkel α auf dem Breitenkreis fortschreiten (wohingegen er i.a., d.h. für nicht-integrable Schiefprodukte, beliebige Punkte auf der Sphäre erreichen kann).

Durch eine geeignete Wahl des Koordinatensystems für den Spinfreiheitsgrad kann die auftretende nicht-abelsche Berry-Phase im integrablen Fall effektiv zu einer abelschen (d.h. echten) Phase reduziert werden, deren Einfluß auf die Quantisierungsbedingungen von derselben Ordnung ist, wie der Maslov-Beitrag. In der Folge wird jedem geschlossenen Weg $\mathcal{C}_j$ auf einem Torus im Phasenraum (siehe Abb. 2) eindeutig ein Winkel α_j (vgl. Abb. 5) zugeordnet, der angibt, wie weit der klassische Spinvektor entlang dieses Weges gedreht wird. Die resultierende geometrische Phase ändert die Quantisierungsbedingungen dann zu

$$\oint_{\mathcal{C}_j} \boldsymbol{p}\,\mathrm{d}\boldsymbol{x} \stackrel{!}{=} 2\pi\hbar \left(n_j + \frac{\mu_j}{4} + m_s \frac{\alpha_j}{2\pi} \right) , \qquad (11)$$

wobei die Orientierungsquantenzahl m_s für den Spin wie üblich die Werte $-s, -s+1, \ldots, s$ annehmen kann.

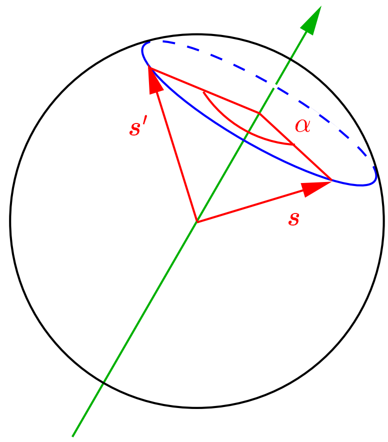

Abbildung 5: Die Sphäre als Phasenraum des klassischen Spins: Für integrable Systeme ist der Winkel zwischen einer lokal definierten Achse (grün) und dem Spinvektor $\boldsymbol{s}$ eine Erhaltungsgröße, d.h. die Breitenkreise (blau) bezüglich dieser Achse sind invariant.

Sommerfelds Formel: Maslov- und Spinbeitrag heben sich gegenseitig auf

Die Quantisierungsbedingungen (11) versetzen uns letztendlich in die Lage, zu unserer Ausgangsfrage nach der Sommerfeldschen Feinstrukturformel von 1916 zurückzukehren. Sommerfeld konnte seinerzeit weder die Maslov-Korrektur noch den Spinbeitrag berücksichtigen, und es ist daher das Zusammenspiel beider, viel später hinzugekommener Korrekturen zu untersuchen.

Beim relativistischen Kepler Problem sind wieder (wie im nicht-relativistischen Fall) die beiden Wirkungsvariablen I_r und L für die Radialbewegung und den Drehimpuls zu betrachten. Anders als im nicht-relativistischen Fall (siehe oben) treten aber beide Größen unabhängig in der Hamiltonfunktion $H(I_r, L)$ auf, und Fehler in den Quantisierungsbedingungen können sich nicht wie dort gegenseitig ausgleichen. Sommerfeld quantisierte wieder gemäß $I_r = \hbar n_r$, $n_r = 0, 1, 2, \ldots$, und $L = \hbar l$, $l = 1, 2, 3, \ldots$ (mit denselben Begründungen wie im nicht-relativistischen Fall). Die Quantisierungsvorschrift (11) verlangt, daß wir sowohl die Maslovkorrektur (jeweils $\frac{1}{2}$ da beide Maslovindizes, wie im nicht-relativistischen Fall, den Wert 2 haben), als auch den Spinbeitrag berücksichtigen. Eine elementare, aber aufwendige Rechnung [21, 18] liefert in diesem Fall für beide Präzessionswinkel, α_L und α_r, den Wert 2π – d.h. der Spinbeitrag von $\pm\frac{1}{2}$ (für ein Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen) addiert sich mit dem Maslovbeitrag stets zu einer ganzen Zahl! Durch dieses Zusammenspiel erhalten wir daher dieselben Energieniveaus wie Sommerfeld (eine genaue Analyse zeigt, daß der Fall $l = 0$, $m_s = -\frac{1}{2}$ und damit $L = 0$ auch hier verboten ist). Darüberhinaus ergeben sich durch das im Gegensatz zu Sommerfelds Rechnung andere Zustandekommen der Energieniveaus die richtigen Entartungen, welche Sommerfelds Formel nicht liefern konnte.

Zusammenfassend können wir also heute sagen, daß Sommerfelds Theorie der Feinstruktur tatsächlich – wie in [3] vermutet (s.o.) – deshalb so gute Ergebnisse lieferte, weil sich zwei Korrekturen, die damals beide noch nicht bekannt waren, beim Wasserstoffatom gegenseitig ausgleichen.

Literatur

[1] A. Sommerfeld: *Zur Quantentheorie der Spektrallinien*, Ann. Phys. (Leipzig) **51** (1916) 1–94, 125–167.

[2] A. Sommerfeld: *Atombau und Spektrallinien*, Band I, Friedr. Viehweg & Sohn GmbH, Braunschweig, 8. Aufl., (1969).

[3] W. Yourgrau und S. Mandelstam: *Variational Principles in Dynamics and Quantum Theory*, Dover Publications, New York, 3. Aufl., (1979).

[4] M. Eckert: *Sommerfeld und die Anfänge der Atomtheorie*, Physik in unserer Zeit **26** (1995) 21–28.

[5] A. Einstein: *Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein*, Verh. Dtsch. Phys. Ges. **19** (1917) 82–92.

[6] J. B. Keller: *Semiclassical mechanics*, SIAM Rev. **27** (1985) 485–504.

[7] M. C. Gutzwiller: *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, New York, (1990).

[8] M. C. Gutzwiller: *Von den Übergangsmetallen zur Spurformel*, Physik Journal **2** (2003) 7/8 39–43.

[9] H.-J. Stöckmann: *Quantum Chaos: An Introduction*, Cambridge University Press, Cambridge, (1999).

[10] K. Richter: *Semiclassical Theory of Mesoscopic Quantum Systems*, Nr. 161 in Springer Tracts in Modern Physics, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, (2000).

[11] G. Tanner, K. Richter und J.-M. Rost: *The Theory of Two-Electron Atoms: From the Ground State to Complete Fragmentation*, Rev. Mod. Phys. **72** (2000) 497–544.

[12] M. Brack und R. K. Bhaduri: *Semiclassical Physics*, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, (1997).

[13] M. V. Berry: *Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*, Proc. R. Soc. London Ser. A **392** (1984) 45–57.

[14] R. G. Littlejohn und W. G. Flynn: *Geometric phases in the asymptotic theory of coupled wave equations*, Phys. Rev. A **44** (1991) 5239–5256.

[15] W. Pauli: *Diracs Wellengleichung des Elektrons und geometrische Optik*, Helv. Phys. Acta **5** (1932) 179–199.

[16] S. I. Rubinow und J. B. Keller: *Asymptotic Solution of the Dirac Equation*, Phys. Rev. **131** (1963) 2789–2796.

[17] J. Bolte und S. Keppeler: *A semiclassical approach to the Dirac equation*, Ann. Phys. (NY) **274** (1999) 125–162.

[18] S. Keppeler: *Spinning Particles: Semiclassics and Spectral Statistics*, Nr. 193 in Springer Tracts in Modern Physics, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, (2003).

[19] H. Frisk und T. Guhr: *Spin-Orbit Coupling in Semiclassical Approximation*, Ann. Phys. (NY) **221** (1993) 229–257.

[20] C. Amann und M. Brack: *Semiclassical trace formulae for systems with spin-orbit interactions: successes and limitations of present approaches*, J. Phys. A **35** (2002) 6009–6032.

[21] S. Keppeler: *Semiclassical quantisation rules for the Dirac and Pauli equations*, Ann. Phys. (NY) **304** (2003) 40–71.