NOTIZEN

Quantenmechanik in Separations-Koordinaten

ERNST BRETNÜTZ

Institut für Theoretische Physik A
der Technischen Hochschule Braunschweig

(Z. Naturforschg. **20 a**, 485—486 [1965]; eingegangen am 19. Januar 1965)

If the SCHRÖDINGER equation can be solved by a product of functions, which depend only on one variable (separation), then a complete set of commutable operators exists, which forms a set of quantum mechanical integrals of motion. The eigenvalues of these operators are the separation constants. The operators are explicitely formulated; the physical meaning is discussed.

STÄCKEL entwickelte erstmalig eine systematische Theorie für die Separation der HAMILTON–JACOBIschen Differentialgleichung [1], die später von ROBERTSON [2] mit den gleichen Begriffsbildungen auf die Separation der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung übertragen wurde [3]. Notwendig und hinreichend für eine Separation beider Differentialgleichungen in krummlinigen, orthogonalen Koordinaten ($x_1, \dots, x_f$; f ist die Zahl der Freiheitsgrade des Systems) ist die Existenz der „STÄCKEL-Determinante"

$$|\varphi_{ij}(x_i)| \qquad (i, j = 1, \dots, f),$$

deren Elemente Funktionen nur der einen Koordinate x_i sind. Für eine Separation der SCHRÖDINGER-Gleichung lassen sie sich folgendermaßen aus dem Linienelement

$$ds^2 \underset{\text{Def}}{=} \sum_{i=1}^{f} H_i^2\, dx_i^2$$

des betreffenden Koordinatensystems bestimmen: Mit

$$H \underset{\text{Def.}}{=} \prod_{i=1}^{f} H_i$$

gestatten separable Koordinaten eine Zerlegung des Quotienten

$$H/H_i^2 = f_i(x_i) \cdot a_i(x \neq i) \qquad (i = 1, \dots, f)$$

in ein Produkt von zwei Funktionen, von denen $f_i(x_i)$ nur von der Koordinate x_i, $a_i(x \neq i)$ jedoch von allen übrigen x_j ($j \neq i$) abhängt. Dann ist durch

$$\varphi = H \Big/ \prod_{i=1}^{f} f_i$$

der Wert der Determinante $\varphi = |\varphi_{ij}|$ bestimmt. Ersichtlich ist, abgesehen von singulären Punkten, $\varphi \neq 0$. Die algebraischen Komplemente der ersten Spalte von φ sind weiterhin durch

$$\Phi_{j1} = \varphi / H_j^2 \qquad (j = 1, \dots, f)$$

gegeben. Dies reicht aus, um φ für ein bestimmtes Separationskoordinatensystem aufzustellen, wenn man noch beachtet, daß die Elemente der i-ten Zeile nur von x_i abhängen.

Die potentielle Energie $U(x_1, \dots, x_f)$ muß sich im separablen Fall in der Form

$$U(x) = \sum_{j=1}^{f} \frac{\Phi_{i1}}{\varphi} \mu_i(x_i) = \sum_{i=1}^{f} \frac{\mu_i(x_i)}{H_i^2}$$

mit beliebigen Funktionen $\mu_i(x_i)$ von nur einer Veränderlichen x_i darstellen lassen, um die Separation nicht zu stören.

Die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung in orthogonalen Koordinaten

$$\sum_{i=1}^{f} \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{H}{H_i^2} \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right) + k^2 (E - U(x))\, \psi = 0$$
$$(k^2 = 2\, m/\hbar^2)$$

lautet in Separationskoordinaten mit dem Ansatz

$$\psi(x_1, \dots, x_f) = \prod_{i=1}^{f} X_i(x_i),$$

worin $X_i(x_i)$ nur von x_i abhängt:

$$\sum_{i=1}^{f} \frac{1}{H_i^2} \frac{1}{f_i X_i} \frac{d}{dx_i} \left(f_i \frac{dX_i}{dx_i} \right) + k^2 (E - U(x)) = 0$$

oder mit der Abkürzung

$$s_i(x_i) = \frac{1}{f_i X_i} \frac{d}{dx_i} \left(f_i \frac{dX_i}{dx_i} \right)$$

und mit dem obigen Ansatz für $U(x)$

$$\sum_{i=1}^{f} \Phi_{i1} [s_i(x_i) - k^2 \mu_i(x_i) + k^2 \alpha_1 \varphi_{i1}] = 0 . \qquad (\alpha_1 \equiv E)$$

Diese Beziehung zusammen mit den $f-1$ weiteren Beziehungen

$$\sum_{i=1}^{f} \Phi_{i1} \varphi_{ij} = 0 \qquad (j = 2, 3, \dots, f)$$

führt zu den f Separationsgleichungen in Form von gewöhnlichen Differentialgleichungen, die durch die Separationskonstanten α_j verbunden sind:

$$s_i(x_i) - k^2 \mu_i(x_i) + k^2 \sum_{i=1}^{f} \alpha_j \varphi_{ij}(x_i) = 0$$
$$(i = 1, 2, \dots, f).$$

Da die Determinante $\varphi = |\varphi_{ij}|$ von Null verschieden vorausgesetzt wurde, lassen sich die Separationsglei-

[1] P. STÄCKEL, Habilitationsschrift, Halle/S. 1891; vgl. auch Math. Ann. **42**, 537 [1893], Abschn. 2.

[2] H. P. ROBERTSON, Math. Ann. **98**, 749 [1928].

[3] Siehe auch P. M. MORSE u. H. FESHBACH, Methods of Theoretical Physics, McGraw-Hill Book Co., Inc., New York, Toronto, London 1953, Bd. I, S. 508, 655.

chungen nach den Separationskonstanten auflösen. Hierzu wird die i-te Gleichung mit Φ_{il} multipliziert und anschließend über i summiert:

$$\sum_{i=1}^{f} \Phi_{il}(s_i - k^2 \mu_i) + k^2 \varphi \alpha_l = 0$$

oder

$$\alpha_l = \sum_{i=1}^{f} \frac{\Phi_{il}}{\varphi}\left(-\frac{1}{k^2} s_i(x_i) + \mu_i(x_i)\right)$$

(vgl. [4]) $(l = 1, 2, \ldots, f)$.

Diese Funktionen können als Bewegungsintegrale aufgefaßt und entsprechend quantenmechanisch gedeutet werden:

$$\alpha_l = \sum_{i=1}^{f} \frac{\Phi_{il}}{\varphi}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{f_i X_i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_i}\left(f_i \frac{\mathrm{d}X_i}{\mathrm{d}x_i}\right) + \mu_i(x_i)\right].$$

Wird dies mit $\psi = \prod_{i=1}^{f} X_i(x_i)$ multipliziert,

$$\alpha_l \psi = \sum_{i=1}^{f} \Phi_{il}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi f_i}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(f_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i}\right) + \frac{\mu_i}{\varphi}\psi\right],$$

so liegt es nahe, entsprechend der Definition der Impulsoperatoren in krummlinigen Koordinaten für skalare Wellenfunktionen [5]

$$p_l \psi = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{\sqrt[4]{g}}\frac{\partial}{\partial x_l}(\sqrt[4]{g}\,\psi),$$

(g Determinante des kovarianten Maßtensors) mit den Operatoren

$$p_l \psi = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{\sqrt{\varphi f_l}}\frac{\partial}{\partial x_l}(\sqrt{\varphi f_l}\,\psi) \qquad \text{(es ist } g = H^2\text{)}$$

$\alpha_l \psi$ als Operatorenfunktionen zu schreiben:

$$\alpha_l \psi = \sum_{i=1}^{f} \Phi_{il}\left[\frac{1}{2m}\frac{1}{\sqrt{\varphi f_i}} p_i f_i p_i \frac{1}{\sqrt{\varphi f_i}} + \frac{\mu_i}{\varphi}\right]\psi.$$

Φ_{il} braucht nicht in den Symmetrisationsprozeß einbezogen zu werden, da es nicht von x_i abhängt und demzufolge mit den p_i vertauschbar ist. Der symmetrische Aufbau der Produkte läßt sofort erkennen, daß die α_l selbstadjungierte Operatoren sind. Sie sind weiterhin paarweise miteinander vertauschbar:

Mit der Abkürzung

$$t_i = \frac{1}{2m}\frac{1}{\sqrt{f_i}} p_i f_i p_i \frac{1}{\sqrt{f_i}} + \mu_i$$

wird

$$\alpha_l \psi = \sum_{i=1}^{f} \Phi_{il}\frac{1}{\sqrt{\varphi}} t_i \frac{1}{\sqrt{\varphi}}\psi.$$

Damit kann der Kommutator geschrieben werden:

$$[\alpha_\varkappa, \alpha_\lambda] = \sum_{m,n}\frac{\Phi_{m\varkappa}}{\sqrt{\varphi}} t_m \frac{\Phi_{n\lambda}}{\varphi} t_n \frac{1}{\sqrt{\varphi}} - \sum_{m,n}\frac{\Phi_{n\lambda}}{\sqrt{\varphi}} t_n \frac{\Phi_{m\varkappa}}{\varphi} t_m \frac{1}{\sqrt{\varphi}}.$$

Wird hierin n und m vertauscht

$$[\alpha_\varkappa, \alpha_\lambda] = \sum_{m,n}\frac{\Phi_{n\varkappa}}{\sqrt{\varphi}} t_n \frac{\Phi_{m\lambda}}{\varphi} t_m \frac{1}{\sqrt{\varphi}} - \sum_{m,n}\frac{\Phi_{m\lambda}}{\sqrt{\varphi}} t_m \frac{\Phi_{n\varkappa}}{\varphi} t_n \frac{1}{\sqrt{\varphi}}$$

und beides addiert, so ergibt sich

$$2[\alpha_\varkappa, \alpha_\lambda] = \sum_{m,n}\frac{1}{\sqrt{\varphi}} t_m \frac{\Phi_{m\varkappa}\Phi_{n\lambda} - \Phi_{m\lambda}\Phi_{n\varkappa}}{\varphi} t_n \frac{1}{\sqrt{\varphi}} - \sum_{m,n}\frac{1}{\sqrt{\varphi}} t_n \frac{\Phi_{m\varkappa}\Phi_{n\lambda} - \Phi_{m\lambda}\Phi_{n\varkappa}}{\varphi} t_m \frac{1}{\sqrt{\varphi}}.$$

Nach einem Satz der Determinantentheorie (siehe etwa KOWALEWSKI [6]) ist der zweireihige Minor

$$\Phi_{m\varkappa}\Phi_{n\lambda} - \Phi_{m\lambda}\Phi_{n\varkappa}$$

der zu φ reziproken Determinante gleich dem algebraischen Komplement zu dem gleichindizierten zweireihigen Minor in φ, multipliziert mit φ. Da aber dieses algebraische Komplement in φ keine Elemente aus der m-ten und n-ten Zeile enthält und der Faktor φ sich weghebt, ist der mittlere Bruchstrich mit den Operatoren t_m, t_n vertauschbar. Die t_m bzw. t_n wirken jedoch nur auf x_m bzw. x_n, sind also auch untereinander vertauschbar. Mithin ist

$$[\alpha_\varkappa, \alpha_\lambda] = 0.$$

Die ursprünglichen Beziehungen

$$\alpha_l \psi = \sum_{i=1}^{f} \Phi_{il}\left[\frac{1}{2m}\frac{1}{\sqrt{\varphi f_i}} p_i f_i p_i \frac{1}{\sqrt{\varphi f_i}} + \frac{\mu_i}{\varphi}\right]\psi$$

$$(l = 1, 2, \ldots, f)$$

können also als Eigenwertgleichungen für einen vollständigen Satz vertauschbarer Operatoren angesehen werden, die sämtlich Konstanten der Bewegung sind, denn für $l = 1$ ergibt sich der HAMILTON-Operator H, mit dem also alle anderen Operatoren vertauschbar sind. Da andererseits die Eigenwerte α_l dieser Operatoren ursprünglich als Separationskonstanten für die Separation der SCHRÖDINGER-Gleichung auftraten, besteht die quantenmechanische Bedeutung der Separation in einer simultanen Lösung eines Eigenwertproblems für einen vollständigen Satz vertauschbarer Operatoren. Da wir oben

$$\Phi_{i1} \neq 0 \qquad (i = 1, 2, \ldots, f)$$

fordern mußten, diese Forderung jedoch für

$$\Phi_{ik} \qquad (k = 2, 3, \ldots, f)$$

nicht erfüllt zu sein braucht, stellt die SCHRÖDINGER-Gleichung als Eigenwertgleichung des HAMILTON-Operators auch die stärksten Forderungen an die gemeinsamen Eigenfunktioen; diese werden also durch die SCHRÖDINGER-Gleichung bereits vollständig definiert.

Herrn Prof. Dr. M. KOHLER danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit und für wertvolle weiterführende Hinweise.

[4] Für die HAMILTON–JACOBIsche Differentialgleichung sind die f quadratischen ersten Integrale von STÄCKEL angegeben worden: C. R. Acad. Sci., Paris **116**, 485 [1893].

[5] Siehe etwa W. PAULI im Handbuch der Physik, herausgeg. v. S. FLÜGGE, Verlag Springer, Berlin, Göttingen, Heidelberg 1958, Bd. V, Teil 1, S. 40.

[6] G. KOWALEWSKI, Einführung in die Determinantentheorie, Verlag de Gruyter, 4. Auflage, Berlin 1954, S. 80.