

komplett neu

Zur Quantenmechanik der Boltzmann- gleichung

Diplomarbeit von Peter Wittwer
Ausgeführt im Wintersemester 1979/1980
am Institut für Theoretische Physik der ETHZ
bei Prof. K. Hepp

Inhaltsverzeichnis

	Seite
Einleitung	4
Der (klassische) Grad-Limes, Transportkoeffizienten	4
Beschreibung des Systems	5
1. Der mathematische Formalismus	7
1.1. Kinematik des Systems	7
1.1.1. Operatorformalismus	7
1.1.2. Wignerdarstellung	9
1.2. Dynamik des Systems	11
1.2.1. Operatorformalismus, QM-BBGKY-Hierarchie	11
1.2.2. Wignerdarstellung	13
1.2.2.1. Zeitentwicklung der Dichtematrix in Wignerdarstellung	13
1.2.2.2. QM-BBGKY-Hierarchie in Wignerdarstellung	15
1.2.2.3. Reduzierte QM-BBGKY-Hierarchie in Wignerdarstellung	19
1.3. Darstellungswechsel durch Fouriertransformation	21
1.4. Abseparation der Schwerpunktsbewegung	24
1.5. Zur Streutheorie des elastischen Zweierstosses	26
1.6. Ensembles	28
2. Der QM-Grad-Limes	31
2.1. Skalierung klassisch und quantenmechanisch	31
2.2. Der QM-Grad-Limes	35
2.3. Skalierung der Hierarchien	37
2.3.1. Skalierung der reduzierten QM-BBGKY-Hierarchie; die Analogie zum klassischen Fall	37
2.3.2. Skalierung der QM-BBGKY-Hierarchie	41
3. Die QM-Boltzmann-Gleichung im QM-Grad-Limes	43
3.1. Umstrukturierung der ersten Gleichung der QM- BBGKY-Hierarchie	43
3.2. Skalierung	47

3.3. Der Limes zur Boltzmann-Gleichung	48
4. Die Fujita-Gleichung	57
4.1. "Connected Diagramm Expansion" – Eine Umstrukturierung der ersten Gleichung der QM-BBGKY-Hierarchie mit Hilfe einer Graphentheorie	57
4.2. Skalierung der Fujita-Gleichung und Limes zur Boltzmann-Gleichung	70
5. Diskussion	74
5.1. Der Stossterm für den Fall von n gleichen quantenmechanischen Massenpunkten	74
5.2. Offene Probleme	75
Literatur	78

Einleitung

Der (klassische) Grad-Limes, Transportkoeffizienten

Den Weg von der Liouvillegleichung zur Boltzmann-Gleichung zu finden, von der exakten klassischen Dynamik zur kinetischen Gleichung für ein System von n Massenpunkten, war das Ziel einer Reihe von Arbeiten um das Jahr 1946. In diesen Veröffentlichungen von Bogolubov, Born, Green, Kirkwood und Yvon (1, 2, 3 und 4) wurde die Liouvillegleichung in Form einer Hierarchie von Gleichungen für j -Punkt-Korrelationsfunktionen behandelt, der B(ogolubov)-B(orn)-G(reen)-K(irkwood)-Y(von)-Hierarchie.

1956 zeigte Grad (5), dass die Differentialgleichung für die reduzierte 1-Punkt-Korrelationsfunktion, die erste Gleichung einer zur BBGKY-Hierarchie ähnlichen Hierarchie, gegen die Boltzmann-Gleichung strebt im Grad-Limes (Teilchenzahl n gegen Unendlich, Teilchendurchmesser R gegen Null, bei konstanter mittlerer freier Weglänge. Mathematisch: Skalieren von $n \rightarrow n_\epsilon = 1/\epsilon^n n$, Paarpotential $\phi(q_1 - q_2) \rightarrow \phi_\epsilon(q_1 - q_2) = \phi(\frac{q_1}{\epsilon} - \frac{q_2}{\epsilon})$ und Limes $\epsilon \rightarrow 0$). Diesen Limes führte Cercignani (6) 1972 für ein System von harten Kugeln durch. Für dieses System zeigte Lanford (7) 1974, dass Lösungen der BBGKY-Hierarchie für Zeiten $\sim 1/\epsilon$ der mittleren freien Flugzeit existieren und im Limes gegen Lösungen der Boltzmann-Hierarchie streben. Diese Resultate wurden von King (8) auf positive Potentiale verallgemeinert. Weiter wurde die Konvergenz der Lösungen der BBGKY-Hierarchie gegen Lösungen der Boltzmann-Hierarchie für beliebige positive Zeiten gezeigt, unter der starken Voraussetzung, dass die Norm der Lösungen der BBGKY-Hierarchie beschränkt bleibt.

Die Berechnung von Transportkoeffizienten (9, 10) mit Hilfe der Boltzmann-Gleichung bringt den Vergleich mit dem Experiment. Man erwartet gute Resultate für stark verdünnte Gase, bei nicht zu tiefen Temperaturen, falls Kopplungen an innere Freiheitsgrade der Moleküle vernachlässigbar sind. Für tiefe Temperaturen ergeben sich signifikante Abweichungen zwischen (klassisch) berechneten Koeffizienten und Messwerten (11, 12, 13). Ersetzt man jedoch bei der Berechnung

den Wirkungsquerschnitt in der Boltzmann-Gleichung durch den quantenmechanisch exakten Ausdruck, dann erreicht man wiederum gute Übereinstimmung zwischen experimentellen Werten und theoretischen Voraussagen (11, 12).

Dieses Ersetzen des klassischen Wirkungsquerschnittes durch den quantenmechanischen Ausdruck erscheint zwar plausibel, entbehrt jedoch vorerst jeder theoretischen Grundlage, denn in einer Limesdynamik der klassischen Liouville-Gleichung findet ein quantenmechanischer Wirkungsquerschnitt keinen Platz. Zudem ist man auch in der Interpretation der 1-Punkt-Verteilung in der Boltzmann-Gleichung nicht frei: Bei der Herleitung der Boltzmann-Gleichung über die BBGKY-Hierarchie erscheint diese Verteilungsfunktion als 1-Punkt-Korrelationsfunktion einer klassischen Verteilung über einem klassischen Phasenraum, und man hat nicht nur für den Wirkungsquerschnitt sondern auch für die Verteilungsfunktion eine quantenmechanische Deutung zu finden. Zwar gibt die Wigner-Darstellung der Quantenmechanik (14, 15, 16) quantenmechanische Zustände als Verteilungsfunktionen über einem Phasenraum; diese Verteilungen sind jedoch nicht positiv (16), und nicht wie klassisch als Wahrscheinlichkeitsverteilungen interpretierbar. Um eine quantenmechanische Boltzmann-Gleichung zu begründen kann man daher nicht nachträglich Korrekturen in der klassischen Boltzmann-Gleichung vornehmen, sondern man hat auszugehen von der quantenmechanischen Dynamik.

In der vorliegenden Arbeit wird heuristisch untersucht ob, ausgehend von der quantenmechanischen Dynamik, in einer quantenmechanischen Verallgemeinerung des Grad-Limes eine Boltzmann-Gleichung hergeleitet werden kann mit quantenmechanischem Stossterm, und einer Phasenraum-Verteilungsfunktion die positiv ist und eine Interpretation als Wahrscheinlichkeitsverteilung über dem Phasenraum zulässt.

Beschreibung des Systems

Betrachtet wird ein System von n (verschiedenen oder gleichen) quantenmechanischen Massenpunkten der Masse m in einem beschränkten

Bereich V des \mathbb{R}^3 . Der Hamiltonoperator des Systems sei

$$H = H_0 + H_1$$

$$H_0 = \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m}$$

$$H_1 = \sum_{\substack{i < j \\ \text{Paare}}} \phi(|x_i - x_j|) = \phi(|x|)$$

mit $\phi(|x|) = \sum_{i < j} \phi(x_i - x_j)$ der Superposition von Paarpotentialen $\phi(x_i - x_j) = \phi(x_j - x_i)$. $\phi(x_i - x_j)$ habe die endliche Reichweite R , d.h. $\phi(x_i - x_j) = 0$ falls $|x_i - x_j| > R$. Die Wechselwirkung mit dem (glatten) Rand ∂V wird entweder durch ein Wandpotential oder durch Randbedingungen beschrieben. Als Randbedingungen fordert man beispielsweise elastische Reflexion auf ∂V (mathematisch: für $q_i \in \partial V$ und $p_i \cdot n(q_i) > 0$ ist $\mu^W(x_1, \dots, x_n) = \mu^W(\dots, p_i - 2n(q_i)(p_i \cdot n(q_i)), q_i, \dots)$). Das System sei stark verdünnt, d.h. $\rho = nR^3/V \ll 1$.

Die thermische Wellenlänge $\lambda = \left(\frac{h^2}{2mT}\right)^{1/2}$ ist eine für das Auftreten von Quanteneffekten relevante Grösse. Für Temperaturen $T \gtrsim T_1$, wobei T_1 definiert ist durch $\lambda(T_1) = R$, erwartet man quantenmechanische Korrekturen für Stösse zwischen Massenpunkten. Falls man n gleiche Massenpunkte betrachtet, hat man zusätzlich Austauscheffekte bei den Stössen zu beachten und Effekte der Quantenstatistik zu berücksichtigen für Temperaturen $T \gtrsim T_2$, wobei T_2 definiert ist durch $\lambda(T_2) = (V/n)^{1/3}$. Für Helium-4 hat man beispielsweise die beiden Temperaturen

$$\begin{array}{cc} T_1 & T_2 \\ 76,3 \frac{h^2}{mR^2} & 76,3 \frac{h^2}{m} \left(\frac{n}{V}\right)^{1/3} \\ \approx 72 \text{ K } (R=3 \text{ \AA}) & \approx 9 \cdot 10^4 \text{ K } (p=1 \text{ atm}) \end{array}$$

und Helium-4 (Helium-3) gehorcht der Bose (Fermi)-Statistik. Es wird sich zeigen, dass im betrachteten Limes das System unendlich verdünnt ist ($\rho=0$) und dass Effekte der Quantenstatistik für positive Temperaturen vernachlässigbar werden ($T_2=0$). Daher beschränkt man sich bei der Behandlung des Systems vorerst auf den Fall der Boltzmannstatistik.

1. Der mathematische Formalismus

1.1. Kinematik des Systems

1.1.1. Operatorformalismus

Ein allgemeiner Zustand des Systems sei P (Dichtematrix). Sei $\{q^{(i)}\} = \{q_1, \dots, q_n\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem von Ortsfunktionen. Damit hat man die Ortsdarstellung von P

$$P = \int d q_1^{(i)} d q_2^{(i)} |q_1^{(i)}\rangle \langle q_1^{(i)}| P |q_2^{(i)}\rangle \langle q_2^{(i)}| \quad (1.1)$$

Analog dazu hat man für ein vollständiges Orthonormalsystem von Impulseigenfunktionen $\{p^{(i)}\} = \{p_1, \dots, p_n\}$ die Impulsdarstellung von P

$$P = \int d p_1^{(i)} d p_2^{(i)} |p_1^{(i)}\rangle \langle p_1^{(i)}| P |p_2^{(i)}\rangle \langle p_2^{(i)}| \quad (1.2)$$

Für ein allgemeines vollständiges Orthonormalsystem schreibt man kurz

$$P = P(1, \dots, n) \quad (1.3)$$

Man fordert für P , dass

$$P(\pi(1), \dots, \pi(n)) = P(1, \dots, n) \quad (1.3)$$

für alle $\pi \in S_n =$ volle Permutationsgruppe
der Ziffern $1 \dots n$ (1.4)

Im Falle eines Bose (Fermi)-Systems hätte man die Zustände zu symmetrisieren (antisymmetrisieren). Der Erwartungswert einer Observablen A im Zustand P ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_P &= \text{Tr} PA = \text{Tr}_{1 \dots n} (P(1 \dots n) A(1 \dots n)) = \\ &= \int d q_1^{(i)} d q_2^{(i)} \langle q_1^{(i)} | P | q_2^{(i)} \rangle \langle q_2^{(i)} | A | q_1^{(i)} \rangle = \\ &= \int d p_1^{(i)} d p_2^{(i)} \langle p_1^{(i)} | P | p_2^{(i)} \rangle \langle p_2^{(i)} | A | p_1^{(i)} \rangle \end{aligned} \quad (1.5)$$

Für Summationsobservablen, d.h. Observablen der Form

$$A(n \dots n) = j! \sum_{1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_j \leq n} a_j(i_1 \dots i_j) \quad j \leq n \quad (1.6)$$

mit a_j symmetrisch, d.h.

$$a_j(\pi(1) \dots \pi(j)) = a_j(1 \dots j)$$

für alle $\pi \in S_j =$ volle Permutationsgruppe
der Ziffern $1 \dots j$

gilt

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{n \dots n} P(n \dots n) A(n \dots n) &= j! \sum_{1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_j \leq n} \text{Tr}_{n \dots n} P(n \dots n) a_j(i_1 \dots i_j) = \\ &= j! \frac{n!}{(n-j)! \cdot j!} \text{Tr}_{n \dots n} P(n \dots n) a_j(1 \dots j) = \\ & \quad \text{Tr}_{n \dots n} P_j(1 \dots j) a_j(1 \dots j) = \text{Tr}_{n \dots n} P_j \cdot a_j \end{aligned}$$

d.h. es genügt zum Bilden von Erwartungswerten die Kenntnis von
j-Punkt-Korrelationsfunktionen

$$P_j = \frac{n!}{(n-j)!} \text{Tr}_{n \dots n} P \quad (1.7)$$

Man hat die Normierungen

$$\text{Tr}_{n \dots n} P = 1 \quad (1.8)$$

$$\text{Tr}_{n \dots n} P_j = \frac{n!}{(n-j)!} \stackrel{\text{angew.}}{=} n^j$$

Man definiert reskalierte j-Punkt-Korrelationsfunktionen durch

$$S_j \equiv S_j(1 \dots j) \equiv S(1 \dots j) = n^{-j} P_j \quad (1.9)$$

mit der für den Limes $n \rightarrow \infty$ angepassten Normierung

$$\text{Tr}_{n \dots n} S_j = \frac{n!}{(n-j)!} n^{-j} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1 \quad (1.10)$$

1.1.2. Wignerdarstellung

Wigner definiert eine Phasenraum-Verteilungsfunktion als die Fouriertransformierte der Nebendiagonalelemente der Dichtematrix

$$\begin{aligned} \mu^w(x_1, \dots, x_n) &= \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3n}} \int d^3z e^{\frac{i}{\hbar} p^{(n)} \cdot z^{(n)}} \langle q^{(n)} - \frac{1}{2} z^{(n)} | \rho | q^{(n)} + \frac{1}{2} z^{(n)} \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3n}} \int d^3z e^{-\frac{i}{\hbar} q^{(n)} \cdot z^{(n)}} \langle p^{(n)} - \frac{1}{2} z^{(n)} | \rho | p^{(n)} + \frac{1}{2} z^{(n)} \rangle \end{aligned} \quad (1.11)$$

$$x_i = (p_i, q_i) \quad ; \quad p^{(n)} \cdot z^{(n)} = \sum_{i=1}^n p_i \cdot z_i$$

μ^w hat folgende Eigenschaften

$$\int d^3p \mu^w(p^{(n)}, q^{(n)}) = \langle q^{(n)} | \rho | q^{(n)} \rangle \quad (1.12)$$

$$\int d^3q \mu^w(p^{(n)}, q^{(n)}) = \langle p^{(n)} | \rho | p^{(n)} \rangle \quad (1.13)$$

und

$$\int d^3p d^3q \mu^w(p^{(n)}, q^{(n)}) = 1 \quad (1.14)$$

Das Wigneräquivalente eines Operators ist definiert durch

$$\begin{aligned} A^w(p^{(n)}, q^{(n)}) &= \\ &= \int d^3z e^{\frac{i}{\hbar} p^{(n)} \cdot z^{(n)}} \langle q^{(n)} - \frac{1}{2} z^{(n)} | A | q^{(n)} + \frac{1}{2} z^{(n)} \rangle \\ &= \int d^3z e^{-\frac{i}{\hbar} q^{(n)} \cdot z^{(n)}} \langle p^{(n)} - \frac{1}{2} z^{(n)} | A | p^{(n)} + \frac{1}{2} z^{(n)} \rangle \end{aligned} \quad (1.15)$$

Damit gilt

$$\text{Tr } PA = \int d^3q d^3p A^W(p^{(n)}, q^{(n)}) \mu^n(p^{(n)}, q^{(n)}) \quad (1.16)$$

und somit ist der Erwartungswert jedes Operators durch ein Phasenraumintegral gegeben.

Weitere Eigenschaften von Wigneräquivalenten Operatoren sind

$$(a) \quad A = A(p) \quad A^W = A^W(p) \quad (1.17)$$

$$(b) \quad A = A(q) \quad A^W = A^W(q) \quad (1.18)$$

$$(c) \quad A = \text{const.} \quad A^W = A \quad (1.19)$$

$$(d) \quad \text{Tr } A = \frac{1}{(\omega \hbar)^{3n}} \int d^3p d^3q A^W(p^{(n)}, q^{(n)}) \quad (1.20)$$

$$(e) \quad \int d^3p A^W(p^{(n)}, q^{(n)}) = (\omega \hbar)^{3n} \langle q^{(n)} | A | q^{(n)} \rangle \quad (1.21)$$

$$(f) \quad \int d^3q A^W(p^{(n)}, q^{(n)}) = (\omega \hbar)^{3n} \langle p^{(n)} | A | p^{(n)} \rangle \quad (1.22)$$

Mit (a) und (b) folgt zusammen mit der Linearität der Fouriertransformation, dass das Wigneräquivalente des Hamiltonoperators identisch ist mit der klassischen Hamiltonfunktion

$$H^W(p^{(n)}, q^{(n)}) \equiv H^C(p^{(n)}, q^{(n)}) = \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{i,j=1}^n \phi(q_i - q_j) \quad (1.23)$$

Das Wigneräquivalente eines Produktes von Operatoren kann man darstellen (genügende Regularität der Funktionen $A^W(p^{(n)}, q^{(n)})$, $B^W(p^{(n)}, q^{(n)})$ vorausgesetzt) mit Hilfe der Wigneräquivalenten Operatoren

$$(AB)^W(p^{(n)}, q^{(n)}) = A^W(p^{(n)}, q^{(n)}) e^{\frac{\hbar}{2i} \Lambda} B^W(p^{(n)}, q^{(n)}) = \quad (1.24)$$

$$= B^W(p^{(n)}, q^{(n)}) e^{-\frac{\hbar}{2i} \Lambda} A^W(p^{(n)}, q^{(n)}) \quad (1.25)$$

wobei

$$\Lambda = \Lambda_2 - \Lambda_1 \quad (1.26)$$

$$\Lambda_2 = \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial p^{(1)}}} \cdot \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial q^{(1)}}} = \sum_{i=1}^n \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial p_i}} \cdot \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial q_i}} \quad (1.27)$$

$$\Lambda_1 = \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q^{(1)}}} \cdot \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p^{(1)}}} = \sum_{i=1}^n \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q_i}} \cdot \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p_i}}$$

der Poisson-Operator ist. Durch

$$f_j^{(n)}(x_1, \dots, x_j; t) = \hbar^{-j} \frac{n!}{(n-j)!} \int_{(\mathbb{R}^3 \times V)^{n-j}} d^3x_1 \dots d^3x_n \mu^n(x_1, \dots, x_n; t) \quad (1.28)$$

definiert man reskalierte j-Punkt-Wignerfunktionen. Zum Behandeln der Zeitevolution in Analogie zum klassischen Fall (5, 8) definiert man reduzierte reskalierte j-Punkt-Wignerfunktionen

$$f_j^{(n)}(x_1, \dots, x_j; t) = \hbar^{-j} \frac{n!}{(n-j)!} \int_{\mathbb{R}^{3(n-j)} \times \mathcal{D}(j; t)} d^3x_1 \dots d^3x_n \mu^n(x_1, \dots, x_n; t) \quad (1.29)$$

$$\mathcal{D}(j; t) = \{ |q_A - q_C| \geq R \mid 1 \leq A, j, j+1 \leq n \} \quad (1.30)$$

1.2. Dynamik des Systems

1.2.1. Operatorformalismus, QM-BBGKY-Hierarchie

Für die Zeitentwicklung der Dichtematrix gilt im Schrödingerbild

($\hbar = 1$)

$$\dot{\rho} = -i [H, \rho] \quad (1.31)$$

Man definiert

$$H_0(r..j) = \sum_{i=1}^j \frac{p_i^2}{2m} \quad (1.32)$$

$$H_1(r..j) = \sum_{1 \leq i < k \leq j} \phi(r_i - r_k) \quad (1.33)$$

$$H(r..j) = H_0(r..j) + H_1(r..j) \quad (1.34)$$

und die quantenmechanischen Liouvilleoperatoren

$$L_0(r..j) = [H_0(r..j), \quad] \quad (1.35)$$

$$L_1(r..j) = [L_1(r..j), \dots] \quad (1.36)$$

$$L(r..j) = L_0(r..j) + L_1(r..j) \quad (1.37)$$

Für die Zeitentwicklung der j-Punkt Korrelationsfunktionen (1.7) erhält man

$$\begin{aligned} \dot{P}_j(r..j) &= -i \frac{n!}{(n-j)!} \frac{1}{j^{j+1} \dots j^n} \text{Tr} [H(r..n), P(r..n)] = \\ &= -i \frac{n!}{(n-j)!} \frac{1}{j^{j+1} \dots j^n} \text{Tr} [H(r..j), P(r..n)] + \\ &+ (-i) \frac{n!}{(n-j)!} \frac{1}{j^{j+1} \dots j^n} \sum_{\substack{1 \leq i \leq j \\ j+1 \leq k \leq n}} [H_1(i,k), P(r..n)] + \\ &+ (-i) \frac{n!}{(n-j)!} \frac{1}{j^{j+1} \dots j^n} \text{Tr} [H(y^{j+1}, \dots, n), P(r..n)] \end{aligned}$$

Der dritte Summand der rechten Seite verschwindet wegen der Randbedingungen an das System (1.49). Wegen der Symmetrie von $P(1 \dots n)$ in den Argumenten (1.4) erhält man

$$\begin{aligned} \dot{P}_j^{(n..j)} = & -i [H^{(n..j)}, P_j^{(n..j)}] \\ & + \sum_{i=j+1}^n \text{Tr}(t_i) [H_i^{(i,j+1)}, P_{j+1}^{(n..j+1)}] \end{aligned} \quad (1.38)$$

$$j = 1, \dots, n$$

$$P_n = n! P$$

$$P_{n+1} \equiv 0$$

Dies ist die QM-BBGKY-Hierarchie in Operatorschreibweise. Für reskalierte Dichtematrizen erhält man in Vektorschreibweise

$$\frac{d}{dt} \underline{S} = \underline{L} \underline{S} + \underline{C} \underline{S} \quad (1.39)$$

mit

$$(\underline{S})_j = S_j^{(n..j)}$$

$$\underline{L} = (L_{ij}) \text{ und } L_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ -i L_j^{(n..j)} & i = j \end{cases}$$

$$\underline{C} = (C_{ij}) \text{ und } C_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j-1 \\ C_{ij}^{(j+1)} & i = j-1 \end{cases}$$

$$\text{mit } C_{ij}^{(j+1)} = n \sum_{i=j+1}^n \text{Tr}(t_i) L_i^{(i,j+1)}$$

1.2.2. Wignerdarstellung

1.2.2.1. Zeitentwicklung der Dichtematrix in Wignerdarstellung

Setzt man in die Definition (1.11) der Wignerfunktion für die Zeitentwicklung die Schrödingergleichung (1.31) ein, dann erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mu^w(x_1, \dots, x_n; t) &= \\ &= \frac{1}{i\hbar t P^w} \int d\vec{z} e^{\frac{i}{\hbar} P^w \cdot \vec{z}} \left(q^{10L} \frac{1}{z} \frac{1}{z} \frac{1}{z} \frac{1}{z} [H, P] \right) \mu^w(x_1, \dots, x_n; t) \quad (1.40) \\ &= \frac{1}{i\hbar t P^w} \frac{-i}{\hbar} [H, P]^w(x_1, \dots, x_n; t) \end{aligned}$$

Für den Kommutator in Wignerdarstellung berechnet man mit (1.24) und (1.25)

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar} [H, P]^w &= -\frac{i}{\hbar} [(HP)^w - (PH)^w] = \\ &= \frac{-i}{\hbar} [H^w e^{\frac{t}{\hbar} \Lambda} P^w - P^w e^{-\frac{t}{\hbar} \Lambda} H^w] = \\ &= H^w \frac{-i}{\hbar} (e^{\frac{t}{\hbar} \Lambda} \Lambda - e^{-\frac{t}{\hbar} \Lambda}) P^w = \\ &= \frac{-2}{\hbar} H^w (\sin \frac{t}{\hbar} \Lambda) P^w \quad (1.41) \end{aligned}$$

Mit der Definition (1.26) ist

$$\left(\sin \frac{t}{\hbar} \Lambda \right) = \left(\sin \frac{t}{\hbar} \Lambda_2 \right) \left(\cos \frac{t}{\hbar} \Lambda_1 \right) - \left(\sin \frac{t}{\hbar} \Lambda_1 \right) \left(\cos \frac{t}{\hbar} \Lambda_2 \right) \quad (1.42)$$

Wegen $\mu^w = (2\pi\hbar)^{-3n} P^w$ und mit der speziellen Form (1.23) von H^w hat man schliesslich

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mu^w(x_1, \dots, x_n; t) &= \\ &= \left[-\sum_{i=1}^n \frac{p_i}{m} \frac{\partial}{\partial x_i} + \sum_{1 \leq i < j \leq n} \phi(q_i - q_j) \frac{\sin \frac{t}{\hbar} \Lambda_j}{t/2} \right] \mu^w(x_1, \dots, x_n; t) = \\ &= \left[L^w(t, \dots, n) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} \phi(q_i - q_j) \right] \mu^w(x_1, \dots, x_n; t) = \quad (1.43) \end{aligned}$$

$$= L^w(t, \dots, n) \mu^w(x_1, \dots, x_n; t) \quad (1.44)$$

mit den Definitionen

$$\Phi(q_i - q_k) = \phi(q_i - q_k) \cdot \frac{2}{\hbar} \cdot \sin\left(\frac{\hbar}{2} \left(\frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_k} + \frac{\partial}{\partial q_k} \frac{\partial}{\partial p_i} \right)\right) \quad (1.45)$$

$$L_0^{\omega}(1..j) = \sum_{i=1}^j \frac{p_i^2}{2m} \cdot \frac{\partial}{\partial q_i} \quad (1.46)$$

$$L_1^{\omega}(1..j) = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^j \Phi(q_i - q_k) \quad (1.47)$$

$$L^{\omega}(1..j) = L_0^{\omega}(1..j) + L_1^{\omega}(1..j) \quad (1.48)$$

1.2.2.2. QM-BBGKY-Hierarchie in Wignerdarstellung

Mit der Definition (1.28) für die j-Punkt-Wignerfunktionen und der Zeitentwicklung (1.43) der n-Punkt-Wignerfunktion erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} f_j^{\omega}(x_1, \dots, x_j; t) = & \\ = \hbar^{-j} \frac{n!}{(n-j)!} & \left(\int_{(\mathbb{R}^3)^{n-j}} \sum_{i=1}^j \frac{p_i^2}{2m} \frac{\partial}{\partial q_i} \mu^{\omega}(x_1, \dots, x_n; t) d^3x_1 \dots d^3x_n + \right. \\ & + \int_{(\mathbb{R}^3)^{n-j}} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^j \frac{p_i^2}{2m} \frac{\partial}{\partial q_i} \mu^{\omega}(x_1, \dots, x_n; t) d^3x_1 \dots d^3x_n + \\ & + \int_{(\mathbb{R}^3)^{n-j}} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^j \Phi(q_i - q_k) \mu^{\omega}(x_1, \dots, x_n; t) d^3x_1 \dots d^3x_n + \\ & + \int_{(\mathbb{R}^3)^{n-j}} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^j \Phi(q_i - q_k) \mu^{\omega}(x_1, \dots, x_n; t) d^3x_1 \dots d^3x_n + \\ & \left. + \int_{(\mathbb{R}^3)^{n-j}} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^j \Phi(q_i - q_k) \mu^{\omega}(x_1, \dots, x_n; t) d^3x_1 \dots d^3x_n \right) \end{aligned}$$

Es verschwinden Terme der Form

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_1 \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_2 \frac{\partial}{\partial p_1} \mu^{\alpha}(x_1, \dots, x_n; t) = 0$$

Wegen der Randbedingungen in ∂V (7, 8). Weiter verschwinden Terme der Form

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_1 \frac{\partial}{\partial p_1} \mu^{\alpha}(x_1, \dots, x_n; t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\partial V} \frac{\partial}{\partial p_1} \mu^{\alpha}(x_1, \dots, x_n; t) = 0$$

Etwas allgemeiner gilt

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_1 d^3 p_2 \Phi(p_1, p_2) \mu^{\alpha}(x_1, \dots, x_n; t) = 0 \quad (1.49)$$

denn

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_1 d^3 p_2 \Phi(p_1, p_2) \left(\sin \frac{t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial p_1} \frac{\partial}{\partial p_2} + \frac{\partial}{\partial p_2} \frac{\partial}{\partial p_1} \right) \right) \mu^{\alpha}(x_1, \dots, x_n; t) = \\ & = \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2}\right)^{2\mu}}{(2\mu+1)!} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_1 d^3 p_2 \Phi(p_1, p_2) \left(\frac{\partial}{\partial p_1} \frac{\partial}{\partial p_2} + \frac{\partial}{\partial p_2} \frac{\partial}{\partial p_1} \right)^{2\mu+1} \mu^{\alpha}(x_1, \dots, x_n; t) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & = \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{t}{2}\right)^{2\mu}}{(2\mu+1)!} \sum_{l=0}^{2\mu+1} \binom{2\mu+1}{l} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_1 d^3 p_2 \Phi(p_1, p_2) \cdot \\ & \quad \cdot \left(\frac{\partial}{\partial p_1} \frac{\partial}{\partial p_2} \right)^l \left(\frac{\partial}{\partial p_2} \frac{\partial}{\partial p_1} \right)^{2\mu+1-l} \mu^{\alpha}(x_1, \dots, x_n; t) = \\ & = \begin{cases} l=0 \\ l \neq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

$$= \sum_{\mu=0}^{\infty} \dots \int_{\mathbb{R}^3} d^3 p_2 \left(\frac{\partial}{\partial p_2} \frac{\partial}{\partial p_2} \right)^{2\mu+1} \mu^{\alpha}(x_1, \dots, x_n; t) =$$

$$= \sum_{\mu=0}^{\infty} \dots \int d^3 p_2 \frac{\partial}{\partial p_2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial p_2} \frac{\partial}{\partial p_2} \right)^{\mu} \mu(\dots) \right] =$$

$$= \sum_{\mu=0}^{\infty} \dots \int d^3(p_2) \left[\quad \right] \xrightarrow{0} 0$$

$$\stackrel{(1.4)}{=} \sum_{\mu=0}^{\infty} \dots \int d^3 p_1 \left(\frac{\partial}{\partial p_1} \frac{\partial}{\partial p_1} \right)^{\mu} \mu(x_1 \dots x_n; t) =$$

$$= \sum_{\mu=0}^{\infty} \dots \int d^3(p_1) \left[\quad \right] \xrightarrow{0} 0$$

Damit verschwinden in der Zeitentwicklung die Terme 2 und 4 und es bleibt

$$\frac{\partial}{\partial t} f_j^w(x_1 \dots x_j; t) =$$

$$= \left[\sum_{i=1}^j \frac{p_i}{m} \frac{\partial}{\partial q_i} + \sum_{1 \leq i < k \leq j} \Phi(q_i - q_k) \right] f_j^w(x_1 \dots x_j; t) +$$

$$+ n \frac{\partial}{\partial j} \frac{n!}{(n-j)!} \int d^3 x_{j+1} \dots d^3 x_n \sum_{\substack{1 \leq i \leq j \\ j+1 \leq k \leq n}} \Phi(q_i - q_k) \mu^w(x_1 \dots x_n; t)$$

Wegen der Symmetrie von μ^w in den Argumenten ((1.4) und (1.11)) erhält man schliesslich

$$\frac{\partial}{\partial t} f_j^w(x_1 \dots x_j; t) = L^w(n, j) f_j^w(x_1 \dots x_j; t) +$$

$$+ n \sum_{1 \leq i \leq j} \int d^3 x_{j+1} \Phi(q_i - q_{j+1}) f_{j+1}^w(x_1 \dots x_{j+1}; t) \quad (1.50)$$

Dafür hat man in Vektornotation

$$\frac{d}{dt} f^w = L^w f^w + C^w f^w \quad (1.51)$$

mit

$$(f^w)_j = f_j^w(x_1, \dots, x_j; t)$$

$$L^w = (L_{ij}^w) \quad \text{und} \quad L_{ij}^w = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ L^w(1 \dots j) & i = j \end{cases}$$

$$C^w = (C_{ij}^w) \quad \text{und} \quad C_{ij}^w = \begin{cases} 0 & i \neq j-1 \\ C_{ij}^w & i = j-1 \end{cases}$$

$$\text{mit} \quad C_{ij}^w = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p_{j+1} \sum_{i=1}^j L^w(i, j+1)$$

Allgemein kann man eine Gleichung in Operatorschreibweise sofort in Wignerdarstellung angeben mit Hilfe der folgenden Uebertragungsprinzipien

$$\begin{aligned} -iL_0(1 \dots j) &\longrightarrow L_0^w(1 \dots j) \\ -iL_1(1 \dots j) &\longrightarrow L_1^w(1 \dots j) \\ -iL(1 \dots j) &\longrightarrow L^w(1 \dots j) \\ L_{ij} &\longrightarrow L_{ij}^w \\ C_{ij} &\longrightarrow C_{ij}^w \end{aligned} \quad (1.52)$$

$$T_{j+1} \longrightarrow \int_{\mathbb{R}^3 \times V} d^3p_{j+1} d^3q_{j+1}$$

$$S_j(1 \dots j; t) \longrightarrow f_j^w(x_1, \dots, x_j; t)$$

1.2.2.3. Reduzierte QM-BBGKY-Hierarchie in Wignerdarstellung

Für die reduzierte reskalierte j-Punkt-Wignerfunktion (1.29) hat man die Zeitentwicklung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \epsilon_j^\omega(x_1 \dots x_j; t) &= \\ &= n^{-j} \frac{n!}{(n-j)!} \int d^3x_{j+1} \dots d^3x_n \left\{ - \sum_{i=1}^j \frac{p_i}{m} \frac{\partial}{\partial q_i} + \sum_{1 \leq i < k \leq j} \Phi(q_i - q_k) \right\} \\ &\quad \cdot \mathcal{P}_{(j|j+1)} \mu^\omega(x_1 \dots x_n; t) \end{aligned}$$

Terme in der zweiten Summe sind wegen (1.30) und wegen der endlichen Reichweite des Potentials Null, falls $i \neq j$ und $k \geq j+1$. Terme mit $i \geq j$ und $k \geq j$ werden Null wegen der Randbedingung (1.49). Für die restlichen Terme mit $1 \leq i < k \leq j$ erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \epsilon_j^\omega(x_1 \dots x_j; t) &= \\ &= \sum_{i=1}^j n^{-j} \frac{n!}{(n-j)!} \int d^3x_{j+1} \dots d^3x_n \frac{p_i}{m} \frac{\partial}{\partial q_i} \mu^\omega(x_1 \dots x_n; t) + \\ &\quad \mathcal{P}_{(j|j+1)} \\ &+ \sum_{i=j+1}^n n^{-j} \frac{n!}{(n-j)!} \int d^3x_{j+1} \dots d^3x_n \frac{p_i}{m} \frac{\partial}{\partial q_i} \mu^\omega(x_1 \dots x_n; t) + \\ &\quad \mathcal{P}_{(j|j+1)} \\ &+ \sum_{1 \leq i < k \leq j} \Phi(q_i - q_k) \int d^3x_{j+1} \dots d^3x_n \frac{n!}{(n-j)!} n^{-j} \mu^\omega(x_1 \dots x_n; t) \\ &\quad \mathcal{P}_{(j|j+1)} \\ &= \left[\sum_{i=1}^j \frac{p_i}{m} \frac{\partial}{\partial q_i} + \sum_{1 \leq i < k \leq j} \Phi(q_i - q_k) \right] n^{-j} \frac{n!}{(n-j)!} \int d^3x_{j+1} \dots d^3x_n \\ &\quad \cdot \mu^\omega(x_1 \dots x_n; t) \\ &- \sum_{i=1}^j n^{-j} \frac{n!}{(n-j)!} \left(\sum_{k=j+1}^n \int d\theta(q_k) \hat{n} \cdot \frac{p_i}{m} \int d^3p_k \right) \int d^3x_{j+1} \dots d^3x_n \\ &\quad \cdot \mathcal{P}_{(j|j+1)} \\ &\quad \cdot \mu^\omega(x_1 \dots x_n; t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \cdot \mu^w(x_1, \dots, x_n; t) \\
 & + \sum_{i=1}^j n^{-j} \frac{n!}{(n-j)!} \left(\sum_{k=j+1}^n \int d\sigma(q_k) \prod_{l=1}^k \int d^3 p_l \right) \int d^3 p_{j+1} \dots d^3 p_n \\
 & \quad \left[\sum_{i=1}^j \int \prod_{l=1}^i d^3 p_l \right] \mu^w(x_1, \dots, x_n; t) \\
 & = L^w(1-j) t_j^w(x_1, \dots, x_j; t) + \\
 & \quad + n^{-j} \frac{n!}{(n-j)!} \int d^3 p_{j+2} \dots d^3 p_n \left[\sum_{i=1}^j \int \prod_{l=1}^i d^3 p_l \right] \mu^w(x_1, \dots, x_j; t) \\
 & \quad \cdot d\sigma(q_{j+1})
 \end{aligned}$$

Es ist

$$\begin{aligned}
 & n^{-j} \frac{n!}{(n-j-1)!} \int d^3 p_{j+2} \dots d^3 p_n \mu^w(x_1, \dots, x_n) = \\
 & = n t_{j+1}^w + \frac{n!}{(n-j-1)!} n^{-j} \int d^3 p_{j+2} \dots d^3 p_n \mu^w(x_1, \dots, x_n; t) \\
 & \quad \text{für einige } \ell \geq j+2
 \end{aligned}$$

Fortgesetzte Aufspaltung des Integranden nach "clusters" der Form $\Delta^m(q)$ (8) führt schliesslich auf die reduzierte Hierarchie

$$\frac{d}{dt} \underline{t}^w = L^w \underline{t}^w + B^w \underline{t}^w \tag{1.53}$$

mit

$$(\underline{t}^w)_j = t_j^w(x_1, \dots, x_j; t)$$

$$B^w = (B_{ij}^w) \quad B_{ij}^w = \begin{cases} 0 & i \geq j \\ B_{j,i+1}^w & i < j \end{cases}$$

$$B_{j,i+1}^w = \frac{1}{(i-1)!} \int_{|q_{j+1}-q_i|=R} \int_{\mathbb{R}^m} d^m(q_{j+1}) \dots d^m(q_1) \frac{q_{j+1} - q_i}{|q_{j+1} - q_i|^m} \frac{d^m q_{j+2} \dots d^m q_j}{(i-1)!}$$

wobei $\Delta^m(q)$ definiert ist durch

$$\Delta^m(q) = \left\{ (q_1 \dots q_m) : \text{für jedes } i, 1 \leq i \leq m \text{ existiert eine Kette von Indices } i_0=i, i_1 \dots i_r, \text{ welche alle zwischen } 1 \text{ und } m \text{ liegen, so dass } |q_{i_{k-1}} - q_{i_k}| \leq R \text{ gilt für } 1 \leq k \leq r \text{ und weiter ist } |q_{i_s} - q_i| \leq R \text{ für gewisse } s \text{ zwischen } 0 \text{ und } r. \right\}$$

1.3. Darstellungswechsel durch Fouriertransformation

Es sei in Ortsdarstellung ein Matrixelement

$$\langle q - \frac{1}{2} \underline{z} | [A, B] | q + \frac{1}{2} \underline{z} \rangle$$

gegeben. Für die Darstellungswechsel nach Impuls- und Wignerdarstellung hat man

$$\begin{aligned} & \langle p - \frac{1}{2} \underline{z} | [A, B] | p + \frac{1}{2} \underline{z} \rangle = \\ & = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q d^3 \underline{z} e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot \underline{z}} e^{\frac{i}{\hbar} \underline{z} \cdot \underline{z}} \cdot \langle q - \frac{1}{2} \underline{z} | [A, B] | q + \frac{1}{2} \underline{z} \rangle \\ & = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot \underline{z}} [A, B]^w(\underline{R}, \underline{q}) \end{aligned}$$

mit

$$[A, B]^w(p, q) = \int d^3z e^{\frac{i}{\hbar} z \cdot q} \langle q - \frac{1}{2} z | [A, B] | q + \frac{1}{2} z \rangle$$

und

$$\begin{aligned} \langle q - \frac{1}{2} z | [A, B] | q + \frac{1}{2} z \rangle &= \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p d^3z' e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot q} e^{-\frac{i}{\hbar} z \cdot z'} \\ &\quad \langle p - \frac{1}{2} z' | [A, B] | p + \frac{1}{2} z' \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot q} [A, B]^w(p, z) \end{aligned}$$

mit

$$[A, B]^w(p, z) = \int d^3z' e^{-\frac{i}{\hbar} z' \cdot z} \langle p - \frac{1}{2} z' | [A, B] | p + \frac{1}{2} z' \rangle$$

Man hat wie für (1.41)

$$\begin{aligned} [A, B]^w(p, q) &= \\ &= -2i A^w(p, q) \left(\sin \frac{z}{2} \left(\frac{\partial}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} \right) \right) B^w(p, q) \end{aligned}$$

Weiter ist

$$e^A B e^{-A} = e^{[A, \cdot] B}$$

und wiederum mit (1.41) ist

$$\begin{aligned} \left(e^{-\frac{i}{\hbar} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) t} B e^{\frac{i}{\hbar} H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) t} \right)^w &= \left(e^{-\frac{i}{\hbar} [H(\mathbf{r}, \mathbf{p}), \cdot] t} B \right)^w \\ &= e^{\left(-\frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'} + \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right) t} B^w(p_1, q_1; p_2, q_2) \end{aligned} \quad (1.54)$$

also ist beispielsweise

$$\begin{aligned}
 & -\frac{i}{\hbar} \int \frac{1}{(\omega t)^6} d^3x_1 d^3x_2 e^{-\frac{i}{\hbar} q_1 \cdot x_1} e^{-\frac{i}{\hbar} q_2 \cdot x_2} \\
 & \cdot \langle p_1 - \frac{1}{2} \hbar, p_2 - \frac{1}{2} \hbar | [H_1) e^{-\frac{i}{\hbar} H_1 \omega t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0(12) t} \\
 & S_1(12) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0(12) t} e^{\frac{i}{\hbar} H_1 \omega t} | p_1 + \frac{1}{2} \hbar, p_2 + \frac{1}{2} \hbar \rangle \\
 & = \frac{1}{(\omega t)^6} \Phi(q_1 - q_2) \cdot \\
 & \cdot \left(e^{-\frac{i}{\hbar} H_1 \omega t} e^{\frac{i}{\hbar} H_0(12) t} S_1(1) S_1(2) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0(12) t} \right. \\
 & \left. e^{\frac{i}{\hbar} H_1 \omega t} \right)_{(p_1, q_1, p_2, q_2)}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & = \frac{1}{(\omega t)^6} \Phi(q_1 - q_2) \cdot \\
 & \cdot e^{+\frac{p_1}{m} \frac{\partial}{\partial q_1} - \frac{p_2}{m} \frac{\partial}{\partial q_2} + \Phi(q_1 - q_2)} t \\
 & \cdot e^{(\frac{p_1}{m} \frac{\partial}{\partial q_1} + \frac{p_2}{m} \frac{\partial}{\partial q_2}) t} (S_1(1) S_1(2))^{\omega} \quad (1.55)
 \end{aligned}$$

Weiter ist

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{(\omega t)^6} (S_1(1) S_1(2))^{\omega} & \equiv \frac{1}{(\omega t)^6} S_1^{\omega}(1) S_1^{\omega}(2) = \\
 & = f_1^{\omega}(p_1, q_1; t) f_1^{\omega}(p_2, q_2; t) \quad (1.56)
 \end{aligned}$$

denn man hat nach Definition die Fouriertransformationen

$$\begin{aligned}
 f_1^{\omega}(p, q; t) & = \frac{1}{(\omega t)^3} \int d^3x e^{-\frac{i}{\hbar} q \cdot x} \langle p - \frac{1}{2} \hbar | S_1 | p + \frac{1}{2} \hbar \rangle \\
 & = \frac{1}{(\omega t)^3} S_1^{\omega} \quad (1.57)
 \end{aligned}$$

und

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \left\langle \left(\frac{p_1 + p_2}{2} \right) - \frac{(p_1 - p_2)}{2} \middle| \mathcal{G}_1 \middle| \left(\frac{p_1 + p_2}{2} \right) + \frac{(p_1 - p_2)}{2} \right\rangle \quad (1.58)$$

$$= \int d^3x e^{\frac{i}{\hbar} (p_1 - p_2) \cdot x} \int d^3y \left(\frac{p_1 + p_2}{2} \right)_i \mathcal{G}_1(y_i, t)$$

1.4. Abseparation der Schwerpunktsbewegung (17)

Den Zweiteilchen-Hamiltonoperator $H(12)$ ((1.32), (1.33) und (1.34)) kann man schreiben

$$H(12) = H_0(12) + H_1(12) = H_{SP} + h \quad (1.59)$$

wobei

$$H_{SP} = \frac{(p_1 + p_2)^2}{2(2m)}$$

und

$$h = h_0 + H_1(12)$$

mit

$$h_0 = \frac{\left(\frac{p_1 - p_2}{2} \right)^2}{2 \cdot \left(\frac{m}{2} \right)} \quad (1.60)$$

Für Matrixelemente $\langle p_1, p_2 | \phi_{pp} | b_1, b_2 \rangle$ hat man

$$\langle p_1, p_2 | \phi_{pp} | b_1, b_2 \rangle =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d^3x_1 d^3x_2 d^3y_1 d^3y_2 e^{-\frac{i}{\hbar} p_1 x_1} e^{-\frac{i}{\hbar} p_2 x_2}$$

$$\cdot e^{\frac{i}{\hbar} b_1 y_1} e^{\frac{i}{\hbar} b_2 y_2} \langle x_1, x_2 | \phi_{pp} | y_1, y_2 \rangle =$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^6} \int d^3\left(\frac{x_1+x_2}{2}\right) d^3(x_1-x_2) d^3\left(\frac{y_1+y_2}{2}\right) d^3(y_1-y_2) \\
 &\quad \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} p_1 \left(\frac{x_1+x_2}{2} + \frac{x_1-x_2}{2}\right)} e^{-\frac{i}{\hbar} p_2 \left(\frac{x_1+x_2}{2} - \frac{x_1-x_2}{2}\right)} \\
 &\quad \cdot e^{\frac{i}{\hbar} b_1 \left(\frac{y_1+y_2}{2} + \frac{y_1-y_2}{2}\right)} e^{\frac{i}{\hbar} b_2 \left(\frac{y_1+y_2}{2} - \frac{y_1-y_2}{2}\right)} \\
 &\quad \delta^3\left(\frac{x_1+x_2}{2} - \frac{y_1+y_2}{2}\right) \langle x_1-x_2 | \phi_{op} | y_1-y_2 \rangle \\
 &= \delta^3(p_1+p_2-b_1-b_2) \left\langle \frac{p_1-p_2}{2} | \phi_{op} | \frac{b_1-b_2}{2} \right\rangle \\
 &= \delta^3(p_1+p_2-b_1-b_2) \phi^2\left(\frac{p_1-p_2}{2} - \frac{b_1-b_2}{2}\right)
 \end{aligned} \tag{1.61}$$

wobei man die Definition

$$\begin{aligned}
 &\langle x_1-x_2 | \phi_{op} | y_1-y_2 \rangle \\
 &:= \phi\left(\frac{x_1-x_2}{2} + \frac{y_1-y_2}{2}\right) \delta^3(x_1-x_2-y_1+y_2)
 \end{aligned} \tag{1.62}$$

und die Beziehung

$$\begin{aligned}
 &\langle x_1, x_2 | \phi_{op} | y_1, y_2 \rangle = \\
 &= \delta^3(x_1-y_1) \delta^3(x_2-y_2) \phi(y_1-y_2) = \\
 &= \delta^3(x_1-x_2-y_1+y_2) \delta^3\left(\frac{x_1+x_2}{2} - \frac{y_1+y_2}{2}\right) \\
 &\quad \cdot \phi\left(\frac{x_1-x_2}{2} + \frac{y_1-y_2}{2}\right)
 \end{aligned}$$

benützt hat.

1.5. Zur Streutheorie des elastischen Zweierstosses

Formal hat man die Streuoperatoren

$$\begin{aligned}
 \Omega_{\pm} &= \lim_{\epsilon \rightarrow \pm 0} e^{-\frac{i}{\epsilon} H(\pm 2) \frac{t}{\epsilon}} e^{\frac{i}{\epsilon} H_0(\pm 2) \frac{t}{\epsilon}} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow \pm 0} e^{-\frac{i}{\epsilon} h \frac{t}{\epsilon}} e^{\frac{i}{\epsilon} h_0 \frac{t}{\epsilon}} \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow \pm 0} \Omega_{\pm} \frac{t}{\epsilon}
 \end{aligned}
 \tag{1.63}$$

und die Greensfunktionen

$$G_{\pm} = \frac{1}{E - h \pm i\epsilon}
 \tag{1.64}$$

$$G_{\pm}^{\circ} = \frac{1}{E - h_0 \pm i\epsilon}
 \tag{1.65}$$

Es gelten die Beziehungen

$$\Omega_{\pm} = \mathbb{1} + G_{\pm} H_{\pm}(\pm 2)
 \tag{1.66}$$

$$G_{\pm} = G_{\pm}^{\circ} + G_{\pm}^{\circ} H_0(\pm 2) G_{\pm}
 \tag{1.67}$$

und daraus folgt

$$\begin{aligned}
 G_{\pm} H_{\pm}(\pm 2) &= G_{\pm}^{\circ} H_{\pm}(\pm 2) + G_{\pm}^{\circ} H_{\pm}(\pm 2) G_{\pm} H_{\pm}(\pm 2) = \\
 &= G_{\pm}^{\circ} H_{\pm}(\pm 2) + G_{\pm}^{\circ} H_{\pm}(\pm 2) \Omega_{\pm} - G_{\pm}^{\circ} H_{\pm}(\pm 2) = \\
 &= G_{\pm}^{\circ} H_{\pm}(\pm 2) \Omega_{\pm}
 \end{aligned}$$

Ein T-Matrix-Element ist definiert durch

$$\begin{aligned} \langle \varphi_f | T | \varphi_i \rangle &= \langle \varphi_f | H_+(z) \Omega_+ | \varphi_i \rangle = \\ &= \langle \varphi_f | H_+(z) | \varphi_i^+ \rangle \end{aligned}$$

und falls die Hilberträume der Anfangs- und Endzustände identifiziert werden können

$$\langle \mathcal{L}_1 | T | \mathcal{L}_2 \rangle = \langle \mathcal{L}_1 | H_+(z) \Omega_+ | \mathcal{L}_2 \rangle \quad (1.68)$$

Damit berechnet man beispielsweise

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{L}_1 | \Omega_+^* | \mathcal{L}_2 \rangle &= \langle \mathcal{L}_1 | (1 + G_+ H_+(z))^* | \mathcal{L}_2 \rangle = \\ &= \langle \mathcal{L}_1 | (1 + G_+^* H_+(z) \Omega_+)^* | \mathcal{L}_2 \rangle = \\ &= \delta^3(\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_2) + \frac{1}{E(\mathcal{L}_2) - E(\mathcal{L}_1) - i\epsilon} \langle \mathcal{L}_2 | H_+(z) \Omega_+ | \mathcal{L}_1 \rangle^{cc} \\ &= \delta^3(\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_2) + \frac{1}{E(\mathcal{L}_1) - E(\mathcal{L}_2) - i\epsilon} \langle \mathcal{L}_1 | T^* | \mathcal{L}_2 \rangle \end{aligned} \quad (1.69)$$

und analog

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{L}_1 | \Omega_+ | \mathcal{L}_2 \rangle &= \\ &= \delta^3(\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_2) + \frac{1}{E(\mathcal{L}_2) - E(\mathcal{L}_1) + i\epsilon} \langle \mathcal{L}_1 | T | \mathcal{L}_2 \rangle \end{aligned} \quad (1.70)$$

wobei

$$E(\mathcal{L}) = \frac{\mathcal{L}^2}{2 \cdot (\frac{1}{2})}$$

Es gilt das optische Theorem

$$\text{Im} \langle \mathcal{L}_1 | T | \mathcal{L}_1 \rangle = -\pi \int d^3 \mathcal{L}_2 \| \langle \mathcal{L}_2 | T | \mathcal{L}_1 \rangle \|^2 \delta^3(E(\mathcal{L}_1) - E(\mathcal{L}_2)) \quad (1.71)$$

Zum Auswerten von Integralen über $\frac{1}{x+i\epsilon}$ benützt man die formale Beziehung

$$\frac{1}{x+i\epsilon} = \frac{P}{x} - i\pi \delta(x) \quad (1.72)$$

Der Zusammenhang zwischen T-Matrix-Element und differentiellem Wirkungsquerschnitt ist

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_k(\underline{a}_1 \rightarrow \underline{a}_2) = \frac{1}{4} \left(\frac{m}{E}\right)^2 |\langle \underline{a}_2 | T | \underline{a}_1 \rangle|^2 \quad (1.73)$$

1.6. Ensembles

Das klassische kanonische Ensemble, für das klassische System mit Hamiltonfunktion (1.23) ist

$$\mu^{cl}(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{Z^{cl}} e^{-\beta H^{cl}(x_1, \dots, x_n)} \quad (1.74)$$

mit

$$Z^{cl} = \int_{(\mathbb{R}^{3N} \times V)^n} d\mathbf{q} d\mathbf{p} e^{-\beta H^{cl}(\mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{q}^{(1)})}$$

Bei Skalierung des Potentials $\phi(\mathbf{q}) \rightarrow \epsilon \phi(\mathbf{q})$ geht die Zustandssumme über in

$$Z_\epsilon^{cl} = \int_{(\mathbb{R}^{3N} \times V)^n} d\mathbf{p} d\mathbf{q} e^{-\beta \left(\sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^n \epsilon \phi\left(\frac{\mathbf{q}_i}{\epsilon}, \frac{\mathbf{q}_i}{\epsilon}\right) \right)} \quad (1.75)$$

$$\xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} Z_{free}^{cl} = \int_{\mathbb{R}^{3N}} d\mathbf{p} e^{-\beta \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m}}$$

Im Grad-Limes geht das kanonische Ensemble des Systems über in das kanonische Ensemble für das ideale Gas.

Das quantenmechanische kanonische Ensemble ist

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$$

mit

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H}$$

In Wignerdarstellung hat man

$$\mu^w(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{Z^w} (e^{-\beta H})^w$$

und

$$Z^w = \int_{(\mathbb{R}^3 \times V)^n} d^3p d^3q (e^{-\beta H})^w(x_1, \dots, x_n) \quad (1.76)$$

Zur Berechnung von $(e^{-\beta H})^w$ setzt man

$$\Omega^w = (e^{-\beta H})^w$$

leitet nach β ab und erhält mit (1.24), (1.25)

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} \Omega^w &= (-e^{-\beta H} H)^w = (-H e^{-\beta H})^w = \\ &= -\Omega^w e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} H^w = -H^w e^{\frac{i}{\hbar} \Lambda} \Omega^w = \\ &= -\Omega^w e^{-\frac{i}{\hbar} \Lambda} H^w \end{aligned}$$

also

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \Omega^w = -H^w \left(\cos \frac{i}{\hbar} \Lambda \right) \Omega^w \quad (1.77)$$

und

$$\Omega^w(\beta=0) = 1 \quad (1.78)$$

Gleichung (1.77) zusammen mit der Anfangsbedingung (1.78) ist die Bloch-Gleichung. Sie hat die Lösung (15)

$$\Omega^{\omega} = e^{-\beta H^{\omega} \omega \frac{t}{\hbar} \Lambda} \quad (1.79)$$

Das quantenmechanische grosskanonische Ensemble ist

$$\rho^{\theta} = \frac{1}{z^{\theta}} e^{-\beta H_{op} + \beta \mu N_{op}} \quad (1.80)$$

$$z^{\theta} = \text{Tr}_{\theta} e^{-\beta H_{op} + \beta \mu N_{op}}$$

wobei $\theta = +1$ (-1) im Fall von Bose (Fermi)-Statistik, und $\theta = 0$ im Fall von Boltzmannstatistik. Tr ist die Spur über symmetrisierte Zustände im Bosefall und über antisymmetrisierte Zustände im Fermifall. Im Fall von Boltzmannstatistik geht die Spur über Zustände ohne speziellen Symmetriecharakter.

Für $H_{op} = H_0$ hat man beispielsweise explizit in Wignerdarstellung

$$\rho^{\omega \theta}(\varphi, \varphi) = \varphi_{\theta}(\varphi) \quad (1.81)$$

$$\varphi_{\theta}(\varphi) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{n} [e^{\beta(E(\varphi) - \mu)} + \theta]^{-1} =$$

$$= (2\pi\hbar)^{-3} \frac{1}{n} e^{\beta\mu} e^{-\beta E(\varphi)} (1 + \theta e^{\beta\mu} e^{-\beta E(\varphi)} + \dots)$$

Man hat

$$e^{\beta\mu} = e^{\frac{1}{kT}\mu} = \lambda^3 [1 - \theta \lambda^{-3/2} \lambda^3 + O(\lambda^6 n^2)]$$

wobei λ die thermische Wellenlänge. Damit wird

$$\varphi_{\theta}(\varphi) = (2\pi\hbar)^{-3} \frac{1}{n} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \lambda^3 e^{-\beta E(\varphi)} [1 - \theta (e^{\beta\mu} - E(\varphi)) - O(\lambda^3) + O(\lambda^6 n^2)] \quad (1.82)$$

$$= (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{-\beta E(\varphi)} [1 + \theta O(\lambda^3) + O(\lambda^6 n^2)]$$

2. Der QM-Grad-Limes

2.1. Skalierung klassisch und quantenmechanisch

Klassisch multipliziert sich bei Skalierung des Wechselwirkungspotentials

$\phi(q, q_0) \rightarrow \phi_\epsilon(q, q_0) = \phi(\frac{q}{\epsilon}, \frac{q_0}{\epsilon})$ der differentielle Wirkungsquerschnitt eines elastischen Zweierstosses mit ϵ^2 . Beim

Skalieren schrumpft zwar der Wechselwirkungsbereich von R auf

ϵR , die Dynamik des Stosses bleibt jedoch bis auf Skalierungen in

Ort und Zeit dieselbe. Genauer: Sei vor dem Skalieren ein Massen-

punkt zur Zeit t am Orte $q(t)$ mit dem Impuls $p(t)$. Nach dem Skalieren

findet man den Massenpunkt zur Zeit t am skalierten Ort $q_\epsilon(t) = q(t/\epsilon) \cdot \epsilon$

mit demselben Impuls $p(t/\epsilon)$. Diese Eigenschaft spiegelt sich wieder

in der Kovarianz der klassischen Bewegungsgleichung unter Skalierung

$$\frac{d}{dt} q_\epsilon(t) = \frac{d}{dt} \epsilon q(t/\epsilon) = \frac{d}{d(t/\epsilon)} q(t/\epsilon) = p(t/\epsilon) \frac{1}{m} \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} m^2 \frac{d^2}{dt^2} q_\epsilon(t) &= \frac{d}{dt} p(t/\epsilon) = \frac{1}{\epsilon} \frac{d}{d(t/\epsilon)} p(t/\epsilon) = \\ &= -\frac{1}{\epsilon} \frac{d}{dq} \phi(q) = -\frac{d}{d(\frac{q}{\epsilon})} \phi(\frac{q}{\epsilon}) = -\frac{d}{dq_\epsilon} \phi_\epsilon(q_\epsilon) \end{aligned} \quad (2.2)$$

Quantenmechanisch skaliert man vorerst wiederum das Potential

$\phi(q)$ zu $\phi_\epsilon(q) = \phi(\frac{q}{\epsilon})$. Dabei schrumpft wie gehabt der

Radius der Wechselwirkungssphäre von R auf ϵR . Dass dabei der

quantenmechanische Wirkungsquerschnitt bis auf Multiplikation mit

ϵ^2 invariant bleibt kann man jedoch nicht erwarten, denn die charakte-

ristische quantenmechanische Wellenlänge $\lambda = \left(\frac{h v}{m v}\right)^{1/2}$ bleibt von der

Skalierung unberührt. Diese Invarianzeigenschaft erwartet man von der

Forderung $R/\lambda = \text{konstant}$, also der zusätzlichen Skalierung

$$t \rightarrow t_\epsilon = \epsilon t \quad (2.3)$$

Eine Wellenfunktion $\psi(q, t)$ wird skaliert zu

$$\psi_\epsilon(q, t) = \frac{1}{\epsilon^{3/2}} \psi(\frac{q}{\epsilon}, \frac{t}{\epsilon}) \quad (2.4)$$

mit der Normierung

$$\int_{\mathbb{E}^3 B} \psi_{\epsilon}^*(q, t) \psi_{\epsilon}(q, t) d^3 q = \frac{1}{\epsilon^{3/2}} \int \psi^*\left(\frac{q}{\epsilon}, \frac{t}{\epsilon}\right) \psi\left(\frac{q}{\epsilon}, \frac{t}{\epsilon}\right) d^3 \left(\frac{q}{\epsilon}\right) \quad (2.5)$$

$$= \int_B \psi^*\left(\frac{q}{\epsilon}, \frac{t}{\epsilon}\right) \psi\left(\frac{q}{\epsilon}, \frac{t}{\epsilon}\right) d^3 \left(\frac{q}{\epsilon}\right) = 1$$

Diese Skalierung lässt (in Analogie zu der klassischen Gleichung (2.1)) Erwartungswerte von Impulsen ungeändert

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar \epsilon}{i} \int_{\mathbb{E}^3 B} \psi_{\epsilon}^*(q, t) \frac{\partial}{\partial q} \psi_{\epsilon}(q, t) = \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\epsilon}{\epsilon^3} \int_{\mathbb{E}^3 B} \psi^*\left(\frac{q}{\epsilon}, \frac{t}{\epsilon}\right) \frac{\partial}{\partial q} \psi\left(\frac{q}{\epsilon}, \frac{t}{\epsilon}\right) d^3 q = \\ &= \frac{\hbar}{i} \int_B \psi^*\left(\frac{q}{\epsilon}, \frac{t}{\epsilon}\right) \frac{\partial}{\partial \frac{q}{\epsilon}} \psi\left(\frac{q}{\epsilon}, \frac{t}{\epsilon}\right) d^3 \left(\frac{q}{\epsilon}\right) = \\ &= \langle p \rangle_{\psi_{\epsilon}} \end{aligned} \quad (2.6)$$

und die Schrödingergleichung ist kovariant unter Skalierung

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar \epsilon}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\epsilon}(q, t) &= -\frac{\epsilon \hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{\epsilon^{3/2}} \psi\left(\frac{q}{\epsilon}, \frac{t}{\epsilon}\right) = \\ &= \frac{1}{\epsilon^{3/2}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \left(\frac{q}{\epsilon}\right)^2} + \phi\left(\frac{q}{\epsilon}\right) \right) \psi\left(\frac{q}{\epsilon}, \frac{t}{\epsilon}\right) = \\ &= \left(-\frac{\hbar \epsilon^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \phi_{\epsilon}(q) \right) \psi_{\epsilon}(q, t) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Die Invarianz des Wirkungsquerschnittes bis auf Multiplikation mit ϵ^2 zeigt die folgende Rechnung. Man definiert

$$U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} \phi(r) \quad ; \quad R = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

$$p = \hbar R$$

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)(p, \vartheta, \varphi) = |f(p, \vartheta, \varphi)|^2 \quad (2.8)$$

Dabei ist

$$f(p, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{4\pi} \int \phi_{p_i}(r) U(r) \psi_{p_i}^+(r) d^3r$$

$$H = p \cdot \hat{r}$$

mit

$$\phi_{p_i}(r) = (2\pi)^{3/2} e^{i\vec{r} \cdot \vec{p}_i}$$

und

$$\psi_{p_i}^+(r) = \phi_{p_i}(r) + \int G_0^+(r, r'; p_i) U(r') \psi_{p_i}^+(r') d^3r' \quad (2.9)$$

wobei die Asymptotik gelten soll

$$\begin{aligned} \psi_{p_i}^+(r) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi)^{3/2} \left[e^{i\vec{r} \cdot \vec{p}_i} + f(p, \vartheta, \varphi) \frac{e^{i\vec{r} \cdot \vec{p}_r}}{r} \right] \\ &= \phi_{p_i}(r) + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} f(p, \vartheta, \varphi) \frac{1}{r} e^{i\vec{r} \cdot \vec{p}_r} \end{aligned}$$

Für die Greensfunktion hat man

$$G_0^{(+)}(r, r'; p_i) = \frac{1}{r} \frac{1}{(2\pi)^3} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int \frac{e^{i\vec{p} \cdot (r-r')}}{p^2 - p_i^2 - i\delta} d^3p$$

Die Skalierung ist gegeben durch

$$k \longrightarrow k_e = \frac{1}{e} k$$

$$U(r) \longrightarrow U'(r) = \frac{1}{e} U(r/e)$$

Man berechnet die skalierte Streuamplitude mit

$$f^E(p, \omega, \varphi) = \frac{-1}{4\pi} \int \phi_{p_i}^E(\underline{r}') U(\underline{r}') \psi_{p_i}^{+E}(\underline{r}') d^3r' -$$

$$= \frac{-1}{4\pi} \cdot \epsilon \cdot \int \phi_{p_i}^E(\underline{r}') U(\underline{r}') \psi_{p_i}^{+E}(\underline{r}') d^3r'$$

Es gilt

$$\phi_{p_i}^E(\underline{r}') = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}'} = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}'} = \phi_{p_i}(\underline{r}')$$

und

$$\psi_{p_i}^{+E}(\underline{r}') = \phi_{p_i}^E(\underline{r}') +$$

$$+ \int G_0^{+E}(\underline{r}', \underline{r}''; p_i) U(\underline{r}'') \psi_{p_i}^{+E}(\underline{r}'') d^3r''$$

$$= \phi_{p_i}(\underline{r}') +$$

$$+ \epsilon \int G_0^{+E}(\underline{r}', \underline{r}''; p_i) U(\underline{r}'') \psi_{p_i}^{+E}(\underline{r}'') d^3r''$$
(2.10)

Für die skalierte Greenfunktion berechnet man

$$G_0^{+E}(\underline{r}', \underline{r}''; p_i) = \frac{-1}{2\epsilon} \frac{1}{\hbar \omega} \lim_{\delta \rightarrow 0} \int \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_i \cdot (\underline{r}' - \underline{r}'') \cdot \epsilon}}{p^2 - p_i^2 - i\delta} d^3p$$

$$= \frac{1}{\epsilon} G_0^+(\underline{r}', \underline{r}''; p_i)$$

also gilt für die Gleichung (2.10)

$$\psi_{p_i}^{+E}(\underline{r}') = \phi_{p_i}(\underline{r}') +$$

$$+ \int G_0^+(\underline{r}', \underline{r}''; p_i) U(\underline{r}'') \psi_{p_i}^{+E}(\underline{r}'') d^3r''$$

und damit hat man für die Lösung

$$\psi_{p_i}^{+\epsilon}(\epsilon \mathbf{r}^i) = \psi_{p_i}^+(\mathbf{r}^i)$$

Die skalierte Streuamplitude wird also

$$\begin{aligned} f^{\epsilon}(\mathbf{p}, \omega, \varphi) &= \epsilon \cdot \frac{-1}{4\pi} \int \psi_{p_i}^+(\mathbf{r}^i) U(\mathbf{r}^i) \psi_{p_i}^+(\mathbf{r}^i) d\mathbf{r}^i \\ &= \epsilon f(\mathbf{p}, \omega, \varphi) \end{aligned} \quad (2.11)$$

und der skalierte Wirkungsquerschnitt

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)^{\epsilon}(\mathbf{p}, \omega, \varphi) &= |f^{\epsilon}(\mathbf{p}, \omega, \varphi)|^2 = \\ &= \epsilon^2 |f(\mathbf{p}, \omega, \varphi)|^2 \\ &= \epsilon^2 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)(\mathbf{p}, \omega, \varphi) \end{aligned} \quad (2.12)$$

2.2. Der QM-Grad-Limes

Verlangt man wie im klassischen Fall des Grad-Limes: Anzahl n der Massenpunkte gegen Unendlich, Radius R des Wechselwirkungspotentials gegen Null, mit konstant bleibender mittlerer freier Weglänge, also $nR^2 = \text{konstant}$, und zusätzlich die Invarianz des differentiellen Wirkungsquerschnittes bis auf die Multiplikation mit ϵ^2 , dann hat man als Verallgemeinerung des Grad-Limes auf den quantenmechanischen Fall

die Skalierung

$$\begin{aligned} n &\longrightarrow n_{\epsilon} = \frac{1}{\epsilon^2} n \\ \phi(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) &\longrightarrow \phi_{\epsilon}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) = \phi\left(\frac{\mathbf{p}_1}{\epsilon} - \frac{\mathbf{p}_2}{\epsilon}\right) \\ t &\longrightarrow t_{\epsilon} = \epsilon t \end{aligned} \quad (2.13)$$

und den Limes

$$\epsilon \longrightarrow 0 \quad (2.14)$$

Wegen

$$\lambda^3 \epsilon = \frac{R \epsilon^3 N \epsilon}{V} = \frac{R N}{V} \cdot \epsilon = n \epsilon \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0 \quad (2.15)$$

liefert der QM-Grad-Limes (wie auch schon der Grad-Limes) ein unendlich verdünntes System. Wegen

$$\lambda(T_2) = \left(\frac{2\pi}{m k T_2} \right)^{3/2} \epsilon = \left(\frac{V}{n} \right)^{1/3} \quad (2.16)$$

also

$$T_2 = \left(\frac{2\pi}{m k} \right) \epsilon^2 \left(\frac{V}{n} \right)^{2/3} \quad (2.17)$$

gilt im QM-Grad-Limes

$$T_2 \epsilon = T_2 \cdot \epsilon^2 \cdot \epsilon^{-4/3} = T_2 \cdot \epsilon^{2/3} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0 \quad (2.18)$$

Für positive Temperaturen sind somit im QM-Grad-Limes quantenstatistische Korrelationen vernachlässigbar. Tatsächlich gilt auch für das freie grosskanonische Ensemble (1.81) wegen (1.82) die Asymptotik

$$f_i^{gr}(\rho, \rho) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} (2\pi m k T)^{3/2} \epsilon^{-3} e^{-\beta E(\rho)} \quad (2.19)$$

denn

$$(\lambda^3 n / \epsilon) = (\lambda^3 n) \epsilon^3 \frac{1}{\epsilon^2} = (\lambda^3 n) \epsilon \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0 \quad (2.20)$$

Im QM-Grad-Limes geht also das freie quantenmechanische grosskanonische Ensemble über in die Verteilungsfunktion für das klassische ideale Gas mit Boltzmannstatistik. Weiter wird im QM-Grad-Limes das quantenmechanische kanonische Ensemble identisch mit dem klassischen kanonischen Ensemble im Grad-Limes. Bei Skalierung des Potentials und von \hbar geht die Zustandssumme (1.76) über in

$$Z_{\epsilon}^{\omega} = \int_{(R^3 \times V)^N} d\mathbf{q}^N d\mathbf{p}^N e^{-\beta \left(\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i < j} \phi \left(\frac{R}{\epsilon} - \frac{q_{ij}}{\epsilon} \right) \right)} \left(\omega \frac{\epsilon^3}{2} N \right) \quad (2.21)$$

und wiederum gilt, wie schon für (1.75), dass

$$\underline{z}^w \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \underline{z}^w_{\text{frei}} \equiv \underline{z}^c_{\text{frei}} \quad (2.22)$$

2.3. Skalierung der Hierarchien

2.3.1. Skalierung der reduzierten QM-BBGKY-Hierarchie;

die Analogie zum klassischen Fall (8)

Nach Skalierung lautet die reduzierte QM-BBGKY-Hierarchie

$$\frac{d}{dt} \underline{f}^E = L^E \underline{f}^E + B^E \underline{f}^E \quad (2.23)$$

mit

$$L^E = (L_{ij}^E) \quad L_{ij}^E = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ L_0^w(1, \dots, j) + \\ + \frac{1}{\epsilon} \sum_{k=1}^{s-1} \phi\left(\frac{q_i}{\epsilon} - \frac{q_k}{\epsilon}\right) & i=j \end{cases}$$

$$B^E = (B_{ij}^E) \quad B_{ij}^E = \begin{cases} 0 & i \leq j \\ B_{j_1 j_2 \dots j_s}^E & s \geq 1 \end{cases}$$

$$B_{j_1 j_2 \dots j_s}^E = n_\epsilon \sum_{i=1}^{s-1} \int d^3 p_{j_1+1} \int d\omega(q_{j_1+1}) \cdot \frac{p_{j_1+1} - p_i}{m} \cdot \int \frac{d^3 p_{j_1+2} \dots d^3 p_{j_s}}{(s-1)!} \Delta_\epsilon^{s-1}(q_{j_1+1})$$

$|q_{j_1+1} - q_i| = R_\epsilon$

(2.24)

$$= (n_\epsilon \cdot \epsilon^3)^{s-1} \cdot n_\epsilon \sum_{i=1}^{s-1} \int d^3 p_{j_1+1} \int d\omega(q_{j_1+1}) \cdot \frac{p_{j_1+1} - p_i}{m} \cdot \int \frac{d^3(\frac{q_{j_1+2}}{\epsilon}) d^3 p_{j_1+3} \dots d^3(\frac{q_{j_s}}{\epsilon}) d^3 p_{j_s}}{(s-1)!} \Delta_\epsilon^{s-1}(q_{j_1+1})$$

$|q_{j_1+1} - q_i| = R_\epsilon$

Die erste Gleichung der Hierarchie ist

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} L_1^E(p_1, q_1; t) &= \\
 &= -\frac{p_1}{m} \frac{\partial}{\partial q_1} L_1^E(p_1, q_1; t) + \\
 &+ \sum_{s=2}^{n_1} n_E (n_E \cdot \epsilon^3)^{s-2} \int d^3 p_2 \int d\omega(q_2) \hat{n} \cdot \frac{p_2 - p_1}{m} \\
 &\quad |q_2 - q_1 = R_E \\
 &\quad \int \frac{d^3 x_2 \dots d^3 x_s}{(s-2)!} L_s^E(q_1, p_1, \dots, p_{s-1}, p_s; t) \\
 &\quad \Delta^{s-2}(q_{j+1})
 \end{aligned} \tag{2.25}$$

oder auch

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} L_1^E(p_1, q_1; t) &= \\
 &= -\frac{p_1}{m} \frac{\partial}{\partial q_1} L_1^E(p_1, q_1; t) + \\
 &+ n_E \epsilon^2 R^2 \int d^3 p_2 d\omega(q_2) \hat{\omega} \cdot \frac{p_2 - p_1}{m} \cdot \\
 &\quad \hat{\omega} \cdot (p_2 - p_1) > 0 \\
 &\quad \cdot [L_2^E(q_1, p_1, q_1 + R_E \hat{\omega}, p_2; t) - L_2^E(q_1, p_1, q_1 - R_E \hat{\omega}, p_2; t)] \\
 &+ n_E \epsilon^2 R^2 \sum_{s=3}^{n_1} (n_E \cdot \epsilon^3)^{s-2} (\dots) \int (\dots) \\
 &\quad \Delta^{s-2}(q_{j+1})
 \end{aligned} \tag{2.26}$$

denn

$$\begin{aligned}
 n_E \int d^3 p_2 \int d\omega(q_2) \hat{n} \cdot \frac{p_2 - p_1}{m} L_2^E(q_1, p_1, q_1, p_2; t) - \\
 |q_2 - q_1 = R_E \\
 = n_E \epsilon^2 R^2 \int d^3 p_2 d\omega(q_2) \hat{\omega} \cdot \frac{p_2 - p_1}{m} L_2^E(q_1, p_1, q_1 + R_E \hat{\omega}, p_2; t) \\
 \hat{\omega} \cdot (p_2 - p_1) \neq 0
 \end{aligned}$$

In Analogie zum klassischen Fall des Grad-Limes erwartet man als Limesdynamik

$$\frac{d}{dt} \underline{t}^{\circ} = L^{\circ} \underline{t}^{\circ} + B^{\circ} \underline{t}^{\circ} \quad (2.27)$$

mit

$$L^{\circ} = (L_{ij}^{\circ}) \quad L_{ij}^{\circ} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ L_{ij}^{\circ}(\mathbf{r}, \mathbf{v}) & i = j \end{cases}$$

$$B^{\circ} = (B_{ij}^{\circ}) \quad B_{ij}^{\circ} = \begin{cases} 0 & k \neq j+1 \\ B_{ij, j+1}^{\circ} & k = j+1 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} & (B_{ij, j+1}^{\circ} \underline{t}_{j+1}^{\circ})(\mathbf{x}_i, \dots, \mathbf{y}_{j+1}, t) = \\ & = n R^2 \int d^3 p_{j+1} \int d^3 v_{j+1} \bar{\omega} \cdot \frac{p_{j+1}^i - p_i^i}{m} \end{aligned}$$

$$\left\{ \underline{t}_{j+1}^{\circ}(q_i, p_i, \dots, q_i, p_i', \dots, q_i, p_i') - \underline{t}_{j+1}^{\circ}(\dots, q_i, p_i, \dots, q_i, p_i) \right\}$$

und p_i^i und p_{j+1}^i sind auslaufende (einlaufende) Impulse eines elastischen Zweierstoßes mit einlaufenden (auslaufenden) Impulsen p_i^i , p_{j+1}^i . Das Oberflächenintegral des Stossterms sollte dabei als ein Integral über den quantenmechanischen Wirkungsquerschnitt interpretierbar sein.

Zum Untersuchendes Stossterms schreibt man die Lösungen der reduzierten QM-BBGKY-Hierarchie und der erwarteten Boltzmann-hierarchie als formale Potenzreihen

$$\underline{t}^E(t) = S^E(t) \underline{t}^E(0) + \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_1} dt_k S^E(t-t_1) B^E \dots S^E(t_1-t_0) \underline{t}^E(0) \quad (2.28)$$

$$\underline{t}^{\circ}(t) = S^{\circ}(t) \underline{t}^{\circ}(0) + \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_1} dt_k S^{\circ}(t-t_1) B^{\circ} \dots S^{\circ}(t_1-t_0) \underline{t}^{\circ}(0) \quad (2.29)$$

Im Limes sollte gelten

$$\underline{L}^\epsilon(t) \longrightarrow \underline{L}^0(t) \quad (2.30)$$

d.h. man erwartet dass die Aufspaltung gilt

$$B^\epsilon = \hat{B}^\epsilon + \check{B}^\epsilon$$

$$(\hat{B}^\epsilon \underline{L}^\epsilon)_R = \sum_{s=2}^{\infty} (B_{R, R+s}^\epsilon \underline{L}_{R+s}^\epsilon)(x_1 \dots x_k; t) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0$$

$$(\check{B}^\epsilon \underline{L}^\epsilon)_R = (B_{R, R+1}^\epsilon \underline{L}_{R+1}^\epsilon)(x_1 \dots x_k; t)$$

$$\xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} (B^0 \underline{L}^0)_R$$

$$S^\epsilon(t) = e^{L^\epsilon t} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} e^{L^0 t} = S^0(t)$$

Damit wird die Untersuchung des Terms

$$(S^\epsilon(t_1) B^\epsilon S^\epsilon(t_2) \underline{L}^\epsilon)_R = \quad (2.31)$$

$$= \sum_{s=1}^{\infty} (S_R^\epsilon(t_1) B_{R, R+s}^\epsilon S_{R+s}^\epsilon(t_2) \underline{L}_{R+s}^\epsilon)(x_1 \dots x_k; t)$$

nötig. Dafür untersucht man vorerst einen Term

$$(S_R^\epsilon(t_1) \hat{B}_{R, R+1}^\epsilon S_{R+1}^\epsilon(t_2) \underline{L}_{R+1}^\epsilon)(x_1 \dots x_k; t) \quad (2.32)$$

Analog zum klassischen Fall hat man:

$S_k^\epsilon(t_1)$ wird zur freien Zeitevolution, falls der Phasenpunkt $(x_1 \dots x_k)$ die Bedingung $|q_i - q_j| > R_\epsilon$ $1 \leq i \neq j \leq k$ erfüllt. Unter freier Zeitevolution geht $(x_1 \dots x_k)$ über in $(x_1' \dots x_k') = (q_1 - p_1/m t_1, q_1, \dots, q_k - p_k/m t_1)$ und für fast alle $(x_1 \dots x_k)$ bleibt dabei $|q_i - q_j| > R_\epsilon$, $1 \leq i \neq j \leq k$ erhalten, wenn nur ϵ genügend klein.

Der Operator $\hat{B}_{k, k+1}^\epsilon$ bringt einen zusätzlichen Phasenpunkt $x_{k+1}' = (q_1' + R_\epsilon, p_{k+1}')$ in die Zeitevolution. Man hat die beiden Fälle

(a) $(p'_{k+1} - p'_i) \cdot \delta < 0$

Unter $S_{k+1}^\epsilon(t_2)$ bleibt $|q'_{k+1} - q'_i| > R_\epsilon$, und zusätzlich bleibt auch $|q'_j - q'_{k+1}| > R_\epsilon$ wenn man p'_{k+1} im Komplement der (k-1) Kollisionskegel ($j=1, \dots, k$) wählt. Damit wird auch $S_{k+1}^\epsilon(t_2)$ zur freien Zeitevolution $S_{k+1}^0(t_2)$, falls nur ϵ genügend klein, bis auf eine Menge vom Mass Null.

(b) $(p'_{k+1} - p'_i) \cdot \delta > 0$

Unter $S_{k+1}^\epsilon(t_2)$ wird $|q'_{k+1} - q'_i| < R_\epsilon$ und die Zeitevolution ist durch den vollen quantenmechanischen Zeitevolutionsoperator

$$S_{k+1}^\epsilon(t_2) = e^{-i t_2 \left(\sum_{i=1}^{k+1} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{1 \leq i < j \leq k+1} \phi(x_i - x_j) \right)} \quad (2.33)$$

gegeben. Leider gilt die klassische Gleichung

$$\left(S_{k+1}^\epsilon(t_2) \psi_{k+1}^\epsilon \right) (x_1, \dots, x_{k+1}) = \psi_{k+1}^\epsilon (T^{-t_2} (x_1, \dots, x_{k+1})) \quad (2.34)$$

quantenmechanisch nicht. Die Möglichkeit eines Ueberganges zu einer Boltzmannhierarchie wird damit von der genauen Untersuchung des Operators (2.33) abhängig.

2.3.2. Skalierung der QM-BBGKY-Hierarchie

Nach Skalierung lautet die QM-BBGKY-Hierarchie

$$\frac{d}{dt} f^\epsilon = L^\epsilon f^\epsilon + C^\epsilon f^\epsilon \quad (2.35)$$

Mit L^ϵ wie in (2.23) und mit

$$C^E = (C_{ij}^E) \quad C_{ij}^E = \begin{cases} 0 & i \neq j-1 \\ C_{j,j+1}^E & i = j-1 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} C_{ij}^E &= n \epsilon \sum_{i=1}^j \int d^3 p_{j+1} d^3 p_{j+1} \frac{1}{\epsilon} \phi \left(\frac{p_i}{\epsilon} - \frac{p_{j+1}}{\epsilon} \right) \\ &= n \epsilon \epsilon^2 \sum_{i=1}^j \int d^3 \left(\frac{p_{j+1}}{\epsilon} \right) d^3 p_{j+1} \phi \left(\frac{p_i}{\epsilon} - \frac{p_{j+1}}{\epsilon} \right) \end{aligned} \quad (2.36)$$

In Operatorschreibweise hat man für die erste Gleichung in der QM-BBGKY-Hierarchie nach der Skalierung

$$\begin{aligned} \dot{g}_1^E(0; t) &= -i L_{(1)} g_1^E(0; t) + \\ &+ n \epsilon \epsilon^2 \overline{T}_{1,2} - i L_{(1,2)} g_2^E(\epsilon_1, \epsilon_2; t) \end{aligned} \quad (2.37)$$

mit den Übertragungsprinzipien (1.52) zur Wignerdarstellung und zusätzlich mit

$$\begin{aligned} \overline{T}_{1,2} &\xrightarrow{(1)} \int d^3 q_1 d^3 q_2 \delta^3(q_1 - q_2/\epsilon) \delta^3(p_1 - p) \\ g_1^E(0; t) &\xrightarrow{} f_1^E(p, q; t) \\ g_2^E(\epsilon_1, \epsilon_2; t) &\xrightarrow{} f_2^E(\epsilon_1 q_1, p_1, \epsilon_2 q_2, p_2; t) \end{aligned} \quad (2.38)$$

3. Die QM-Boltzmann-Gleichung im QM-Grad-Limes

3.1. Umstrukturierung der ersten Gleichung der QM-BBGKY-Hierarchie

Nach (1.39) lauten die ersten zwei Gleichungen der QM-BBGKY-Hierarchie in Operatorschreibweise

$$\dot{g}(1; t) = -iL(1)g(1; t) - i n \overline{T}_2 L_{,112} g(12; t)$$

$$\begin{aligned} \dot{g}(12; t) = & -iL_{,112} g(12; t) - iL_7 g(12; t) \\ & - i n \overline{T}_3 L_{,113} g(123; t) \\ & - i n \overline{T}_3 L_{,123} g(123; t) \end{aligned}$$

Durch folgende Gleichungen definiert man 2-Punkt- und 3-Punkt-Korrelationsmuster

$$g(12) = g(1)g(2) - g(12) \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} g(123) = & g(123) - g(1)g(23) - g(2)g(13) \\ & - g(3)g(12) - g(1)g(2)g(3) \end{aligned} \quad (3.2)$$

Durch Einsetzen erhält man für die Zeitentwicklung der 2-Punkt-Korrelationen

$$\begin{aligned} \dot{g}(12; t) = & -iL(12)g(12; t) + iL_7(12)g(1; t)g(2; t) \\ & + n \overline{T}_3 [\overset{t}{,123}] \end{aligned} \quad (3.3)$$

mit

$$\begin{aligned} [\overset{t}{,123}] = & -iL_{,112} [g(1; t)g(23; t) + g(13; t)g(12; t) + g(12; t)g(13; t)] \\ & - iL_{,123} [g(12; t)g(13; t) + g(13; t)g(12; t) + g(123; t)] \end{aligned} \quad (3.4)$$

Zusammen mit der Anfangsbedingung $g_{(12)}(t)|_{t=0} = g_{(12)}(0)$ wird aus der Differentialgleichung eine Integralgleichung

$$\begin{aligned}
 g_{(12)}(t) = & e^{-iL_{(12)}t} g_{(12)}(0) + \\
 & + e^{-iL_{(12)}t} \int_0^t dt e^{iL_{(12)}\tau} -iL_{(12)} g_{(1)}(\tau) g_{(2)}(\tau) \\
 & + e^{-iL_{(12)}t} \int_0^t dt e^{iL_{(12)}\tau} n \cdot \vec{T}_{123}[\tau]
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

und man erhält durch Einsetzen in die Zeitentwicklung der ersten Gleichung der Hierarchie

$$\begin{aligned}
 \dot{g}_{(1)}(t) = & -iL_{(1)} g_{(1)}(t) + \\
 & + n \vec{T}_{12} \left\{ -iL_{(12)} [g_{(1)}(t) g_{(2)}(t) + \right. \\
 & \left. + \int_0^t dt e^{-iL_{(12)}(t-\tau)} -iL_{(12)} g_{(1)}(\tau) g_{(2)}(\tau) \right\} \\
 & - n \vec{T}_{12} \left\{ -iL_{(12)} e^{-iL_{(12)}t} g_{(12)}(0) \right\} + \\
 & - n^2 \vec{T}_{123} \left\{ iL_{(12)} e^{-iL_{(12)}t} \int_0^t dt e^{iL_{(12)}\tau} \right. \\
 & \left. \cdot [\tau] \right\}
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

Dies schreibt man durch Addieren und Subtrahieren eines Terms um zu

$$\begin{aligned}
 \dot{g}_{(1)}(t) = & -iL_{(1)} g_{(1)}(t) \\
 & + n \vec{T}_{12} \left\{ -iL_{(12)} [g_{(1)}(t) g_{(2)}(t) + \right.
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

$$\begin{aligned}
 & \left. \int_0^t dt e^{-iL_0(\omega)(t-\tau)} \left[\begin{array}{l} -iL_1(\omega) e^{iL_0(\omega)(t-\tau)} \\ \cdot S(\tau; \tau) S(\tau; \tau) \end{array} \right] \right\} \\
 & + n \overline{T}_r \left\{ -iL_1(\omega) e^{-iL_0(\omega)t} g(\tau; 0) \right\} \\
 & - n^2 \overline{T}_r \left\{ -iL_1(\omega) e^{-iL_0(\omega)t} \int_0^t dt e^{iL_0(\omega)\tau} \right. \\
 & \left. \cdot [\begin{array}{l} \tau \\ \tau \end{array}] \right\} \\
 & + n \overline{T}_r \left\{ -iL_1(\omega) \int_0^t dt e^{-iL_0(\omega)(t-\tau)} \right. \\
 & \left. \cdot [S(\tau; \tau) S(\tau; \tau) - e^{iL_0(\omega)(t-\tau)} S(\tau; \tau) S(\tau; 0)] \right\}
 \end{aligned}$$

Die Beiträge der 5 Terme rechts werden im folgenden einzeln diskutiert

Term 1

Dieser Term beschreibt den freien Fluss. Wären die Terme 2 bis 5 alle identisch Null, dann hätte man als Lösung der Differentialgleichung

$$S(\tau; t) = e^{-iL_0(\omega)t} S(\tau; 0)$$

und dies kann man in Wignerdarstellung explizit schreiben

$$f^{(w)}(\rho, q; t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(\rho, q) t} f^{(w)}(\rho, q; 0) = f^{(w)}\left(\rho, q, -\frac{i}{\hbar} t; 0\right)$$

Term 2

Es ist

$$\frac{d}{dt} e^{-iL_0(\omega)(t-\tau)} e^{iL_0(\omega)(t-\tau)} = -e^{-iL_0(\omega)t} (-iL_1(\omega) e^{iL_0(\omega)(t-\tau)})$$

also

$$\int_0^t e^{-iL_0(t-t')} e^{-iL_0(t-t')} e^{iL_0(t-t')} e^{-iL_0(t-t')} dt' = -1 + e^{-iL_0 t} e^{iL_0 t}$$

Damit erhält man

$$n \text{Tr} \left\{ -iL_{112} e^{-iL_0 t} e^{iL_0 t} \left[S(1; t) S(2; t) \right] \right\} \quad (3.8)$$

Im QM-Grad-Limes strebt dieser Term gegen den Boltzmann-Stoss-term.

Term 3

Dieser Term enthält die Zeitentwicklung der 2-Punkt-Korrelationen und ist identisch Null, falls man zur Zeit t=0 einen unkorrelierten Zustand vorgibt.

Term 4

Dieser Term enthält die Kopplung an die Korrelationsmuster dritter Ordnung. Man erwartet, dass Beiträge dieser Muster gegen Null streben im QM-Grad-Limes.

Term 5

Dieser Term enthält die Korrektur zur markoffschen Approximation in Term 2. Schreibt man für die Lösungen

$$S(1; t) = e^{-iL_0(t-T)} S(1; T) + e^{-iL_0(t-T)} \int_T^t e^{-iL_0(t-t')} e^{-iL_0(t')} dt'$$

$$n \text{Tr} \left\{ -iL_{114} \left[S(1; T) S(4; T) + \int_T^t e^{-iL_0(t-t')} e^{-iL_0(t')} S(1; T) S(4; T) dt' \right] \right\}$$

$$+ n^2 \text{Tr} \left\{ -iL_{115} e^{-iL_0(t)} \int_0^t e^{-iL_0(t-t')} e^{iL_0(t')} dt' \right\} \quad (3.9)$$

$$\left. \begin{aligned}
 & -n \overline{T}_4 \left\{ -i L_{114} e^{-i L_{114} t} g_{(14;0)} \right\} \\
 & g_{(2;1)} = e^{-i L_{12} (t-\tau)} g_{(2;\tau)} + \\
 & + e^{-i L_{12} (t-\tau)} \int_{\tau}^t n \overline{T}_7 d\tau \left(2, \overline{T}_7 (267) \right)
 \end{aligned} \right\} \quad (3.10)$$

und iteriert einmal, dann erhält man

$$\left. \begin{aligned}
 & n^2 \overline{T}_4 \left\{ -i L_{112} e^{-i L_{112} t} \int_{\tau}^t d\tau' e^{-i L_{112} (t-\tau')} \right. \\
 & \left. \left[-g_{(1;\tau')} \int_{\tau}^{\tau'} d\tau'' \left(2, \overline{T}_4 (234) \right) \right. \right. \\
 & \left. \left. - \int_{\tau}^{\tau'} d\tau'' \left(1, \overline{T}_4 (134) \right) \cdot g_{(2;\tau')} \right. \right. \\
 & \left. \left. - \int_{\tau}^{\tau'} d\tau'' \left(1, \overline{T}_4 (134) \right) \cdot n \overline{T}_7 \int_{\tau}^{\tau'} d\tau''' \left(2, \overline{T}_6 (256) \right) \right] \right\}.
 \end{aligned} \right\} \quad (3.11)$$

Im QM-Grad-Limes erwartet man das Verschwinden auch dieses Terms.

3.2. Skalierung

Mit den nach (2.4.2.) skalierten Grössen (2.36), (2.37) und (2.38) wird die umstrukturierte erste Gleichung (3.7) der QM-BBGKY-Hierarchie in Operatorschreibweise

$$\begin{aligned}
 \dot{g}^{\varepsilon_{10};t} & = \\
 & = -i L_{10} g^{\varepsilon_{10};t} +
 \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$\text{(Term 2)} \quad + n_E E^2 \text{Tr} \left\{ -iL_{112} e^{-iL_{112} \frac{t}{E}} \right. \\ \left. e^{iL_{012} \frac{t}{E}} g^{E(E_1, E_2; 0)} \right\}$$

$$\text{(Term 3)} \quad + n_E E^2 \text{Tr} \left\{ -iL_{112} e^{-iL_{112} \frac{t}{E}} \right. \\ \left. g^{E(E_1, E_2; 0)} \right\}$$

$$\text{(Term 4)} \quad - (n_E E^3) (n_E E^2) \text{Tr} \left\{ -iL_{112} e^{-iL_{112} \frac{t}{E}} \int_0^{\frac{t}{E}} d\tau e^{iL_{112} \tau} \right. \\ \left. \cdot [E_1, E_2, E_3] \right\}$$

$$\text{(Term 5)} \quad - (n_E E^3) (n_E E^2) \text{Tr} \left\{ -iL_{112} e^{-iL_{112} \frac{t}{E}} \int_0^{\frac{t}{E}} d\tau \right. \\ \left. \cdot e^{-iL_{112} (\frac{t}{E} - \tau)} \cdot -iL_{112} [g^{E(E_1, E_2)}] \right.$$

(3.12)

$$\left. \int_0^{\frac{t}{E}} d\tau_1 (E_2, \text{Tr} (E_2, E_3, E_4)) \right.$$

$$\left. - \int_0^{\frac{t}{E}} d\tau_1 (E_1, \text{Tr} (E_1, E_3, E_4)) \cdot g^{E(E_2, E_3)} \right\}$$

$$- (n_E E^3)^2 (n_E E^2) \text{Tr} \left\{ -iL_{112} e^{-iL_{112} \frac{t}{E}} \int_0^{\frac{t}{E}} d\tau \right.$$

$$\left. \cdot e^{-iL_{112} (\frac{t}{E} - \tau)} \cdot -iL_{112} \cdot \int_0^{\frac{t}{E}} d\tau_1 (1, \text{Tr} (1, 3, 4)) \right.$$

$$\left. \cdot \int_0^{\frac{t}{E}} d\tau_2 (E_2, \text{Tr} (E_2, E_5, E_6)) \right\}$$

3.3. Der Limes zur Boltzmann-Gleichung

Vernachlässigt man die Terme 4 und 5, dann hat man für einen unkorrelierten Anfangszustand in Wigner-Darstellung

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} f^E(\varphi, q; t) &= \\
 &= -\frac{p_1}{m} \frac{\partial}{\partial q_1} f^E(\varphi, q; t) + \\
 &+ n \epsilon^2 \int d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 q_1 \delta^3(\frac{p_1}{m} - q_1) \delta^3(p_1 - p_2) \delta^3(q_1 - q_2) \\
 &[e^{-(\frac{p_1}{m} \frac{\partial}{\partial q_1} - \frac{p_2}{m} \frac{\partial}{\partial q_2} + \phi(q_1 - q_2)) \frac{t}{\epsilon}} \\
 &\quad \cdot e^{(\frac{p_1}{m} \frac{\partial}{\partial q_1} + \frac{p_2}{m} \frac{\partial}{\partial q_2}) \frac{t}{\epsilon}} \\
 &\quad \cdot f^E(\varphi, q_1; t) f^E(\varphi, q_2; t)]
 \end{aligned}
 \tag{3.13}$$

Mit der Beziehung (1.55) zwischen Impuls- und Wignerdarstellung ist das

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} f^E(\varphi, q; t) &= \\
 &= -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial q} f^E(\varphi, q; t) + \\
 &+ n \epsilon^2 \int d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 q_1 \delta^3(\frac{p_1}{m} - q_1) \\
 &\quad \cdot \frac{1}{i} \frac{1}{(2\pi)^6} d^3 k_1 d^3 k_2 e^{-\frac{i}{\hbar} q_1 \cdot k_1} e^{-\frac{i}{\hbar} q_2 \cdot k_2} \\
 &\quad \cdot \left\{ \langle p - \frac{1}{2} \hbar k_1, p_2 - \frac{1}{2} \hbar k_2 | H_1(1,2) \Omega_{1/2}^E S_1^E(\epsilon_1) S_2^E(\epsilon_2) \cdot \right. \\
 &\quad \quad \cdot \Omega_{1/2}^E | p + \frac{1}{2} \hbar k_1, p_2 + \frac{1}{2} \hbar k_2 \rangle \\
 &\quad \left. - \langle p - \frac{1}{2} \hbar k_1, p_2 - \frac{1}{2} \hbar k_2 | \Omega_{1/2}^E S_1^E(\epsilon_1) S_2^E(\epsilon_2) \Omega_{1/2}^E \right. \\
 &\quad \quad \left. H_1(1,2) | p + \frac{1}{2} \hbar k_1, p_2 + \frac{1}{2} \hbar k_2 \rangle \right\}
 \end{aligned}
 \tag{3.14}$$

Durch Einschreiben weiterer Integrationen über vollständige Impuls-Orthonormalsysteme, und mit der Beziehung (1.58) für die Fourier-

rücktransformation von $g_{d(1)}$ und $g_{d(2)}$ erhält man für den Stossterm in (3.14) (Stossterm =: S)

$$S = \frac{1}{\text{const } \rho} \frac{-i}{\hbar} m_E E^2.$$

$$\int d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 q_1 d^3 q_2 \delta^3(\frac{1}{2} \epsilon - q) d^3 k_1 d^3 k_2 d^3 \alpha d^3 \beta d^3 \rho' d^3 \rho'' d^3 \gamma$$

$$\left\{ \int d^3 p_1 d^3 k_1 d^3 \alpha d^3 \rho' d^3 \gamma \right. \\ \left. e^{-\frac{i}{\hbar} p_1 \cdot k_1} e^{-\frac{i}{\hbar} q_1 \cdot k_1} e^{\frac{i}{\hbar} x'(\rho - \alpha)} e^{\frac{i}{\hbar} y'(\rho - \alpha')} \right\} \quad (3.15)$$

$$f_1^E(\frac{x - \rho}{2}, \epsilon x'; \epsilon) f_2^E(\frac{x' - \rho'}{2}, \epsilon y'; \epsilon)$$

mit

$$\left\{ \int d^3 p_1 d^3 k_1 d^3 \alpha d^3 \rho' d^3 \gamma \right\} = \\ = \left\{ \langle p - \frac{1}{2} k_1; p_2 - \frac{1}{2} k_2 | H_{(1|2)} \Omega_{\frac{1}{2}\epsilon} | \alpha - \alpha' \rangle \right. \\ \left. \langle p p' | \Omega_{\frac{1}{2}\epsilon} | p + \frac{1}{2} k_1; p_2 + \frac{1}{2} k_2 \rangle \right. \\ \left. - \langle p - \frac{1}{2} k_1; p_2 - \frac{1}{2} k_2 | \Omega_{\frac{1}{2}\epsilon} | \alpha - \alpha' \rangle \right. \\ \left. \langle p p' | \Omega_{\frac{1}{2}\epsilon} H_{(1|2)} | p + \frac{1}{2} k_1; p_2 + \frac{1}{2} k_2 \rangle \right\} \quad (3.16)$$

Die Integration über $d^3 q_2$ liefert eine δ -Funktion, und die Integration über $d^3 k_2$ wird damit trivial. Nach Ausführen dieser Integrationen setzt man $k_1 = k$, und rechnet mit der Beziehung (1.61) auf Relativkoordinaten um

$$S = \frac{1}{\text{const } \rho} \frac{-i}{\hbar} m_E E^2 \int d^3 p_1 d^3 q_1 d^3 \alpha d^3 k d^3 \rho' d^3 \gamma \\ d^3 \rho'' d^3 \beta d^3 \gamma e^{-\frac{i}{\hbar} q_1 \cdot k} e^{\frac{i}{\hbar} x'(\rho - \alpha)} e^{\frac{i}{\hbar} y'(\rho - \alpha')} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \left\langle \frac{p-p_2-\frac{1}{2}\alpha}{2} \middle| H_1(12) \Omega_{\frac{1}{2}\epsilon} \middle| \frac{\alpha-\alpha'}{2} \right\rangle \right. \\
 & \quad \left. \left\langle \frac{p-p'}{2} \middle| \Omega_{\frac{1}{2}\epsilon}^* \middle| \frac{p-p_2+\frac{1}{2}\alpha}{2} \right\rangle \right. \\
 & - \left. \left\langle \frac{p-p_2-\frac{1}{2}\alpha}{2} \middle| \Omega_{\frac{1}{2}\epsilon} \middle| \frac{\alpha-\alpha'}{2} \right\rangle \right. \\
 & \quad \left. \left\langle \frac{p-p'}{2} \middle| \Omega_{\frac{1}{2}\epsilon}^* H_1(12) \middle| \frac{p-p_2+\frac{1}{2}\alpha}{2} \right\rangle \right\} \quad (3.17) \\
 & \delta^3(p+p_2-\frac{1}{2}\alpha-\alpha-\alpha') \delta^3(p+p'-p-p_2-\frac{1}{2}\alpha) \\
 & f_1^\epsilon\left(\frac{\alpha+\beta}{2}, \epsilon x', t\right) f_1^\epsilon\left(\frac{\alpha+\beta'}{2}, \epsilon y', t\right)
 \end{aligned}$$

Die trivialen Integrationen über $d^3\alpha'$ und $d^3\beta'$ führt man aus und erhält

$$\begin{aligned}
 S &= \frac{1}{(2\pi)^6} \frac{-i}{\epsilon} \kappa_\epsilon \epsilon^2 \int d^3p_1 d^3p_2 \delta^3(p_1-p_2) d^3\alpha d^3\beta d^3\beta' d^3\alpha' \\
 & \left\{ \left\langle \frac{p-p_2-\frac{1}{2}\alpha}{2} \middle| H_1(12) \Omega_{\frac{1}{2}\epsilon} \middle| \frac{2\beta+\frac{1}{2}\alpha-p-p_2}{2} \right\rangle \right. \\
 & \quad \left. \left\langle \frac{2\beta-p-\frac{1}{2}\alpha-p_2}{2} \middle| \Omega_{\frac{1}{2}\epsilon}^* \middle| \frac{p+\frac{1}{2}\alpha-p-p_2}{2} \right\rangle \right. \\
 & - \left. \left\langle \frac{p-p_2-\frac{1}{2}\alpha}{2} \middle| H_1(12) \middle| \frac{2\alpha+\frac{1}{2}\alpha-p-p_2}{2} \right\rangle \right. \\
 & \quad \left. \left\langle \frac{2\beta-p-\frac{1}{2}\alpha-p_2}{2} \middle| \Omega_{\frac{1}{2}\epsilon}^* H_1(12) \middle| \frac{p+\frac{1}{2}\alpha-p_2}{2} \right\rangle \right\} \\
 & e^{-\frac{i}{\epsilon} \beta' \cdot p} e^{\frac{i}{\epsilon} \alpha' \cdot (p-\beta)} e^{\frac{i}{\epsilon} \beta \cdot (p-p_2)} \\
 & f_1^\epsilon\left(\frac{\alpha+\beta}{2}, \epsilon x', t\right) f_1^\epsilon\left(p+p_2-\frac{\alpha+\beta}{2}, \epsilon y', t\right) \quad (3.18)
 \end{aligned}$$

Nun führt man neue Variablen ein durch

$$h_1 = \frac{1}{2} p - \frac{1}{2} p_2$$

$$h_1' = -\frac{1}{2} d$$

$$h_2 = \frac{x+y}{2} - \frac{p}{2} - \frac{p_2}{2}$$

$$h_2' = d - p + \frac{1}{2} d$$

$$x' = \frac{x+y}{2}$$

$$y' = \frac{x-y}{2}$$

(3.19)

mit den Jakobimatrizen

$$\begin{bmatrix} h_1' \\ h_2' \\ h_3' \\ h_4' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x+p \\ d \\ \frac{x+p}{2} \\ p_2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \frac{x+p}{2} \\ x-p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ p \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

(3.20)

und den Jakobideterminanten 64, 1/8 und 1. Man führt die Substitution durch und erhält

$$S = \frac{-8}{(\cos p)^2} \frac{i}{2} \frac{1}{4} \epsilon^2 \int d h_1 d h_1' d h_2 d h_2' d p_2 d y$$

$$e^{-\frac{i}{2} y \cdot h_2'} e^{-\frac{i}{2} (x - 2 \frac{p}{2}) \cdot h_1'}$$

$$\left\langle h_1 + \frac{h_2'}{2} \mid H_{1(12)} \Omega_{4\epsilon} \mid h_2 + \frac{h_2'}{2} \right\rangle$$

$$\left\langle h_2 - \frac{h_2'}{2} \mid \Omega_{4\epsilon} \mid h_1 - \frac{h_2'}{2} \right\rangle$$

$$-\left\langle h_1 + \frac{h_2'}{2} \mid \Omega_{4\epsilon} \mid h_1 + \frac{h_2'}{2} \right\rangle$$

$$\left\langle h_2 - \frac{h_2'}{2} \mid \Omega_{4\epsilon} H_{1(12)} \mid h_1 - \frac{h_2'}{2} \right\rangle \Big\}$$

$$f_1 \left(\epsilon \frac{x+y}{2}, p - h_1 + h_2, t \right) f_1 \left(\epsilon \frac{x-y}{2}, p - h_1 - h_2, t \right)$$

(3.21)

Nun ersetzt man noch die Integration über d^3x durch eine Integration über $d^3(x - 2q/\epsilon)$.

$$\begin{aligned}
 S &= \frac{-8}{(2\pi)^3} \frac{i}{\epsilon} \frac{1}{\epsilon^2} \int d^3k_1 d^3k_2 d^3k_1' d^3k_2' d^3k_3 \\
 &\quad \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L-\frac{2q}{\epsilon}}^{L-\frac{2q}{\epsilon}} dx_1 \int_{-L-\frac{2q}{\epsilon}}^{L-\frac{2q}{\epsilon}} dx_2 \int_{-L-\frac{2q}{\epsilon}}^{L-\frac{2q}{\epsilon}} dx_3 \\
 &\quad \cdot e^{-\frac{i}{\epsilon} y \cdot k_2} e^{-\frac{i}{\epsilon} t \cdot k_1} \\
 &\quad \{k_1, k_2, k_1', k_2', -4\epsilon\} \\
 &\quad f_1(\epsilon + \frac{x+3}{2}, p - k_1 + k_2, t) \\
 &\quad f_1(\epsilon + \frac{x-3}{2}, p - k_1 - k_2, t)
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

Um den Limes $\epsilon \rightarrow 0$ durchzuführen entwickelt man $f_1(\cdot), f_2(\cdot)$ in eine Taylorreihe in (ϵx) , und hat dann im wesentlichen Integrale der Form

$$\begin{aligned}
 \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L-\frac{q}{\epsilon}}^{L-\frac{q}{\epsilon}} db \varphi(b) \int e^{ibx} f(a + \epsilon x) dx &= \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\epsilon^k}{k!} f^{(k)}(a) \left[\lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L-\frac{q}{\epsilon}}^{L-\frac{q}{\epsilon}} db \varphi(b) \int e^{ibx} x^k dx \right]
 \end{aligned} \tag{3.23}$$

zu betrachten. Darf man die Integrationen über dx und db vertauschen (Anforderungen an $\varphi(b)$), dann liefert k -fache partielle Integration

$$\begin{aligned}
 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\epsilon^k}{k!} f^{(k)}(a) (i)^k \int db \varphi(b) \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L-\frac{q}{\epsilon}}^{L-\frac{q}{\epsilon}} e^{ibx} dx &= \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\epsilon^k}{k!} f^{(k)}(a) (i)^k \int db \varphi^{(k)}(b) \epsilon \delta(b) = \epsilon f(a) \varphi(a) + O(\epsilon)
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

falls die Funktion $\rho(b)$ genügend schnell abfällt im Unendlichen. Für den Stossterm erhält man damit im Limes $\epsilon \rightarrow 0$

$$\begin{aligned}
 S &= 8 (\omega \epsilon)^3 \frac{-i}{\epsilon} n \int d^3 k_1 d^3 k_2 \cdot \\
 &\quad \cdot \{ \langle k_1 | H_{1(12)} | k_2 \rangle \langle k_1 | \Omega_+^\dagger | k_2 \rangle \\
 &\quad - \langle k_1 | \Omega_+ | k_2 \rangle \langle k_2 | \Omega_+^\dagger H_{1(12)} | k_1 \rangle \} \cdot \\
 &\quad \cdot f_+^\circ(p, k_1 - k_2, q; \epsilon) f_+^\circ(p, k_1 + k_2, q; \epsilon)
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

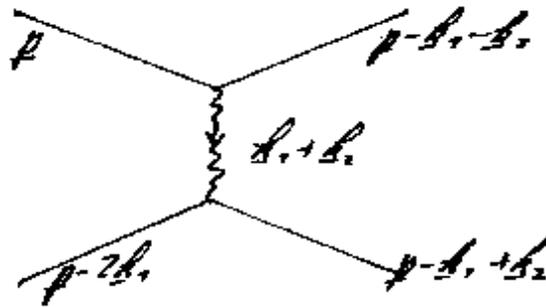
Mit (1.68), (1.69), (1.70) und (1.72) ist dies

$$\begin{aligned}
 S &= \frac{-8i}{\epsilon} (\omega \epsilon)^3 n \left(\int d^3 k_1 \int d^3 k_2 f_+^\circ(p, q; \epsilon) f_+^\circ(p - 2k_2, q; \epsilon) \cdot \right. \\
 &\quad \cdot (\langle k_1 | T | k_2 \rangle - \langle k_2 | T | k_1 \rangle^{cc}) \\
 &\quad \left. + \int d^3 k_1 d^3 k_2 | \langle k_1 | T | k_2 \rangle |^2 \cdot \right. \\
 &\quad \cdot \left(\frac{\rho}{E(k_1) - E(k_2)} + i\pi \delta(E(k_1) - E(k_2)) \right) \\
 &\quad \left. - \left(\frac{\rho}{E(k_2) - E(k_1)} - i\pi \delta(E(k_2) - E(k_1)) \right) \right) \\
 &\quad \cdot f_+^\circ(p - k_2 + k_1, q; \epsilon) f_+^\circ(p - k_1 - k_2, q; \epsilon)
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

und weiter mit dem optischen Theorem (1.71)

$$\begin{aligned}
 S &= n \cdot 8 (\omega \epsilon)^4 \int d^3 k_1 d^3 k_2 \delta(E(k_1) - E(k_2)) | \langle k_1 | T | k_2 \rangle |^2 \cdot \\
 &\quad \cdot \{ f_+^\circ(p - k_1 - k_2, q; \epsilon) f_+^\circ(p - k_1 + k_2, q; \epsilon) \\
 &\quad - f_+^\circ(p, q; \epsilon) f_+^\circ(p - 2k_1, q; \epsilon) \}
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

Dabei ist der Stoss durch folgende Kinematik gegeben



(3.28)

Mit der Beziehung (1.73) für den differentiellen Wirkungsquerschnitt erhält man nach Ausintegration über die δ -Funktion

$$S = \frac{2\pi}{\left(\frac{M}{2}\right)^2} \int d^3k_1 \frac{d^2k_1 k_1^2}{|k_1|} \cdot \left(\frac{d\sigma}{dR}\right)_{\epsilon}(k_1 \rightarrow k_2)$$

(3.29)

$$\cdot \left[f_1^0(p-b_1-k_2, q; -1) f_1^0(p-b_1+k_2, q; +1) \right. \\ \left. - f_1^0(p, q; -1) f_1^0(p-2k_1, q; +1) \right]$$

wobei

$$\epsilon' = \frac{(p-b_1+k_2) - (p-b_1-k_2)}{2k_2} = \frac{k_2}{|k_2|}$$

$$\epsilon = \frac{(p-2k_1) - p}{2k_1} = \frac{-k_1}{|k_1|}$$

Die erneute Substitution

$$p_1 = p \quad p_1' = p - b_1 - b_2$$

$$p_2 = p - 2b_1 \quad p_2' = p - b_1 + b_2$$

(3.30)

mit Jakobideterminante $1/8$ liefert schliesslich die Boltzmann-Gleichung

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} f^{\circ}(p_1, q_1; t) &= \\
 &= -\frac{H_1}{m} \frac{\partial}{\partial q_1} f^{\circ}(p_1, q_1; t) + \\
 &+ \int d^3 e' d^3 p_2 \frac{|p_2 - p_1|}{m} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) (\mathbf{e}, \mathbf{e}'; \frac{|p_2 - p_1|}{m}) \cdot \\
 &\left. \left\{ f^{\circ}(p_1', q_1; t) f^{\circ}(p_2', q_2; t) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - f^{\circ}(p_1, q_1; t) f^{\circ}(p_2, q_2; t) \right\}
 \end{aligned}
 \tag{3.31}$$

oder mit der Definition

$$f(p, q; t) = n f^{\circ}(p, q; t)
 \tag{3.32}$$

also der üblichen Normierung

$$\int d^3 p d^3 q f(p, q; t) = n
 \tag{3.33}$$

die Standardform

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} f(p_1, q_1; t) &= \\
 &= -\frac{H_1}{m} \frac{\partial}{\partial q_1} f(p_1, q_1; t) + \\
 &+ \int d^3 e' d^3 p_2 \frac{|p_2 - p_1|}{m} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) (\mathbf{e}, \mathbf{e}'; \frac{|p_2 - p_1|}{m}) \cdot \\
 &\left. \left\{ f(p_1', q_1; t) f(p_2', q_2; t) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - f(p_1, q_1; t) f(p_2, q_2; t) \right\}
 \end{aligned}
 \tag{3.34}$$

4. Die Fujita-Gleichung (20)

4.1. "Connected Diagramm Expansion" - Eine Umstrukturierung der ersten Gleichung der QM-BBGKY-Hierarchie mit Hilfe einer Graphentheorie

Das Stossintegral über die 2-Punkt-Wignerfunktion $f_2^W(x_1, x_2; t)$ in der Zeitentwicklung der 1-Punkt-Wignerfunktion $f_1^W(x_1; t)$ wird mit Hilfe einer Graphentheorie (Formale Störungstheorie in Potenzen des Wechselwirkungspotentials) approximativ (für grosse n) in eine Summe von Integralen über Potenzen von 1-Punkt-Wignerfunktionen umgeschrieben, und im QM-Grad-Limes untersucht.

Die Schrödingergleichung (1.43) löst man durch eine formale Potenzreihe

$$\mu^W(x_1, \dots, x_n; t) = e^{L_0^W(x_1, \dots, x_n)t} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_{k-1}} dt_k \cdot \phi(t_1) \dots \phi(t_k) \right] \mu^W(x_1, \dots, x_n; 0) \quad (4.1.)$$

mit

$$\phi(t_k) = e^{-L_0^W(x_1, \dots, x_n)t_k} \phi e^{L_0^W(x_1, \dots, x_n)t_k} \quad (4.2)$$

$$\phi = \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_n} \phi^{i_1 i_2 \dots i_n} = \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_n} \phi^{i_1 - i_2 \dots i_n} \quad (4.3)$$

also

$$\phi(t_k) = \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_n} e^{-L_0^W(x_1, \dots, x_n)t_k} \phi^{i_1 i_2 \dots i_n} e^{L_0^W(x_1, \dots, x_n)t_k} \quad (4.4)$$

Diese formale Potenzreihe setzt man ein in den Stossterm (=: G) der Zeitentwicklung (1.50) der 1-Punkt-Wignerfunktion und in deren Definition (1.28).

$$G = \sum_{\substack{i \neq k \\ i \text{ fix}}}^n \int dx_1 \dots dx_n \delta(x-x_i) e^{L_0^{(n,n)} t} \Phi^{(k)}(t) \cdot [1 + \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_{k-1}} dt_k \Phi(t_1) \dots \Phi(t_k)] \mu(x_1 \dots x_n; b) \quad (4.5)$$

$$f_1^{(n)}(p, q; t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \int dx_1 \dots dx_n \delta(x-x_i) e^{L_0^{(n,n)} t} [1 + \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_{k-1}} dt_k \Phi(t_1) \dots \Phi(t_k)] \mu(x_1 \dots x_n; 0) \quad (4.6)$$

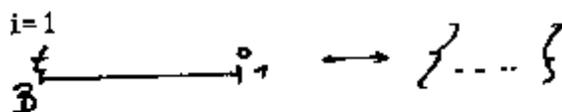
Darstellung der formalen Entwicklung durch Diagramme

Ziel: Identifikation von Faktoren in (4.5) mit Entwicklungen der Form (4.6) um eine geschlossene Gleichung für die Zeitentwicklung der 1-Punkt-Wignerfunktion zu bekommen.

Sei vorerst das System zur Zeit $t=0$ unkorreliert, d.h.

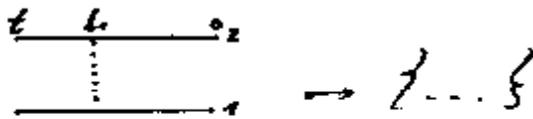
$$\mu(x_1 \dots x_n; 0) = \prod_{i=1}^n f_1^{(n)}(x_i; 0) \quad (4.7)$$

Einfache Diagramme für $f_1^{(n)}(p, q; t)$



Dieser Graph entspricht dem Term 0. Ordnung in der Entwicklung (4.6)

$$\begin{aligned} & \int dx \delta(x-x_i) e^{L_0^{(n,n)} t} \left\{ 1 + \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_{j-1}} dt_j \Phi(t_1) \dots \Phi(t_j) \right\} f_1^{(n)}(x_i; 0) = \\ & = e^{L_0^{(n,n)} t} \left(\int dx_1 \dots dx_n e^{L_0^{(n,n)} t} \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_{j-1}} dt_j \Phi(t_1) \dots \Phi(t_j) \right) f_1^{(n)}(x_i; 0) \quad (4.8) \\ & = e^{L_0^{(n,n)} t} f_1^{(n)}(x_i; 0) \end{aligned}$$



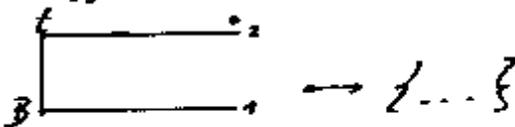
Dieser Graph entspricht dem Φ^{12} -Term 1. Ordnung in der Entwicklung

(4.6)

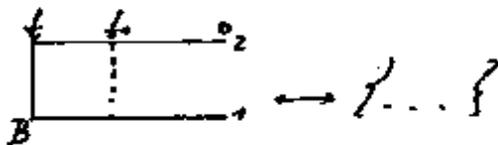
$$\int dx \delta(x-x_1) e^{L_0^{(10)} t} \int dt_1 \Phi^{12}(t_1) \prod_{j=1}^n f_j(x_j; t) = e^{L_0^{(10)} t} \int dx_2 e^{L_0^{(12)} t} \int dt_1 e^{-L_0^{(11)} t_1} \Phi^{12} \left(e^{L_0^{(11)} t_1} f_j(x_j; 0) \right) f_j(x_j; 0) \quad (4.9)$$

Einfache Diagramme für G

$i=1, j=2$



$$\int dx \delta(x-x_1) e^{L_0^{(10)} t} \Phi^{12}(t) \prod_{j=1}^n f_j(x_j; 0) = e^{L_0^{(10)} t} \int dx_2 e^{L_0^{(12)} t} \Phi^{12} \left(f_j(x_j; 0) \right) f_j(x_j; 0) \quad (4.10)$$



$$\int dx \delta(x-x_1) e^{L_0^{(10)} t} \int dt_1 e^{-L_0^{(11)} t_1} \Phi^{12} \left(e^{L_0^{(11)} t_1} f_j(x_j; 0) \right) f_j(x_j; 0) = e^{L_0^{(10)} t} \int dx_2 e^{L_0^{(12)} t} \int dt_1 \Phi^{12}(t_1) \Phi^{12} \left(e^{L_0^{(11)} t_1} f_j(x_j; 0) \right) f_j(x_j; 0) \quad (4.11)$$

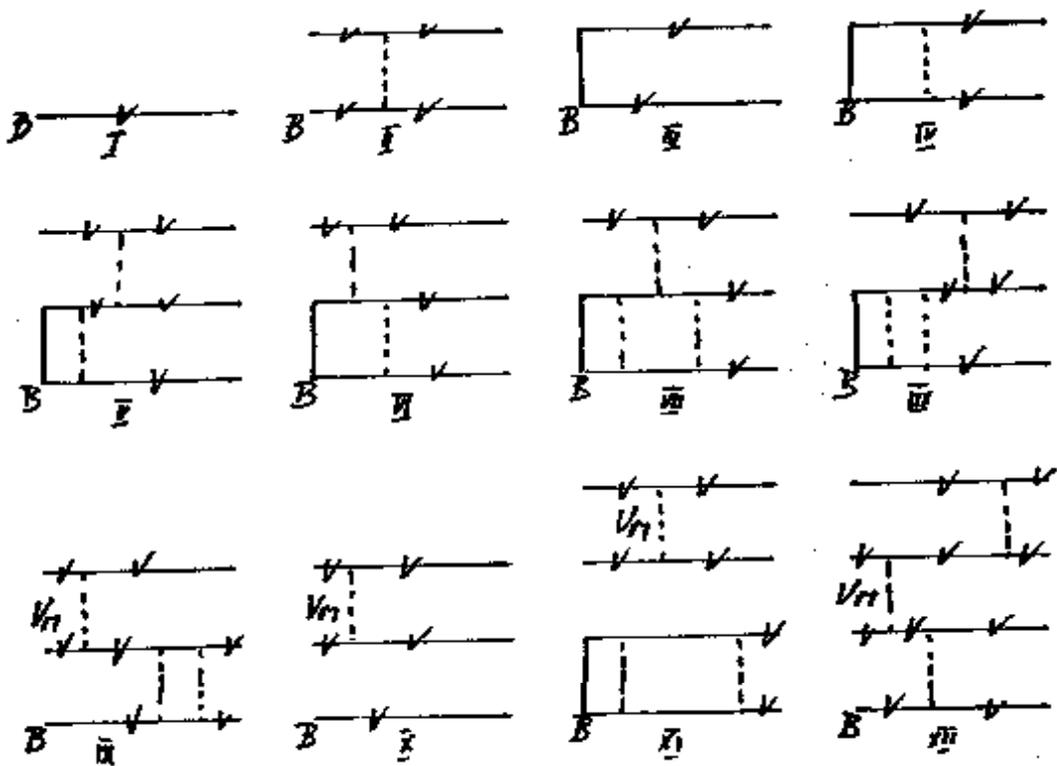
Allgemeines Diagramm

Ein allgemeines Diagramm besteht aus n parallelen horizontalen Strecken (freie Zeitentwicklung der Massenpunkte von 0 bis t) und dazu senkrechten Potentialverbindungen. Verbindungen zur Zeit $t=0$ markieren Anfangskorrelationen. Eine Strecke (Basisstrecke B) wird ausgezeichnet. Die Basisstrecke wird mit i indiziert, die übrigen Strecken mit Indices aus $\{1, \dots, \neq i, \dots, n\}$. Alle Indices ungleich i gehören zu nichttrivialen Integrationsvariablen. Ein nichtindiziertes Diagramm steht für eine Klasse von Diagrammen mit indizierten Strecken. Wegen der Symmetrie von μ^w bezüglich der Permutation der Argumente, ist der Beitrag einer solchen Klasse gleich dem Beitrag eines Repräsentanten, multipliziert mit einem kombinatorischen Faktor.

Klassifizierung der Diagramme

Freie Strecken

Eine Strecke heisst frei, wenn ein Diagramm nach durchtrennen dieser Strecke in zwei Teile zerfällt.
(Mit \checkmark gekennzeichnet).



V_M-Verbindungen

Eine Potentialverbindung, welche die Wechselwirkung zwischen zwei Massenpunkten beschreibt, die zu späteren Zeiten an keiner Wechselwirkung mehr teilnehmen heisst V_M-Verbindung. Ausgenommen sind Verbindungen mit der Basisstrecke.

(Diagramme IX bis XII haben V_M-Verbindungen, nicht aber Diagramm II)

Verbundene und nichtverbundene Diagramme

Besteht ein Diagramm aus zwei oder mehr Teildigrammen, die untereinander keine Potentialverbindungen haben, dann heisst das Diagramm nichtverbunden, sonst verbunden.

(Diagramme X und XI sind nichtverbunden, alle andern verbunden)

Reduzibel und irreduzibel verbundene Diagramme

Ein Diagramm heisst nichttrivial, wenn es mindestens eine Potentialverbindung oder die Basisstrecke enthält.

Ein Diagramm, welches zwei nichttriviale Unterdiagramme enthält, die nur durch eine freie Strecke verbunden sind heisst reduzibel verbunden, sonst irreduzibel verbunden.

(Diagramme V, IX, IX und XII sind reduzibel verbunden)

Bedeutung für die Integrale?

Schiebt man alle Integrationen so weit nach rechts wie möglich, dann erhält man folgende Zuordnung zwischen den oben typisierten Diagrammteilen und Faktoren in den Integralen:

V_M Verbindung

$$\rightarrow \left(\begin{array}{l} \text{nicht } v \\ \text{nicht } \mu \\ \gamma, \delta, \dots \end{array} \right) \left(\int d^3x_1 d^3x_2 e^{L_0(\gamma, \mu; t)} \int_0^{t_2} g(\gamma, \mu; t_1) dt_1 \right) \left(\begin{array}{l} \text{ex. } v \\ \text{ex. } \mu \\ \gamma, \delta, \dots \end{array} \right) \quad (4.12)$$

Ein solcher Faktor ist identisch Null, denn ersetzt man im Integral

$$\left(\int d^3x_1 d^3x_2 e^{L_0(\gamma, \mu; t)} \int_0^{t_2} g(\gamma, \mu; t_1) dt_1 \right)$$

den Integrand durch sein Fouriertransformiertes

$$e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\partial}{\partial q_\nu} \frac{\partial}{\partial p_\mu} + \frac{\partial}{\partial p_\nu} \frac{\partial}{\partial q_\mu} \right) t} \int [\phi(q_\nu + \frac{1}{2} Q_\nu - q_\mu - \frac{1}{2} Q_\mu) - \phi(q_\nu - \frac{1}{2} Q_\nu - q_\mu + \frac{1}{2} Q_\mu)] g_{\nu\mu, t} p_\nu p_\mu \quad (4.13)$$

und transformiert formal zurück unter Benützung der Identität

$$\delta^3(Q_\nu) = \int \frac{d^3 p_\nu}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} p_\nu \cdot Q_\nu}$$

dann erhält man

$$\left(\int d^3 q_\nu d^3 Q_\nu d^3 q_\mu d^3 Q_\mu \right) \text{ (Fouriertransformierter Integrand (4.13))}$$

Ersetzt man in (4.13) den Exponentialfaktor $e^{i/\hbar(\dots)t}$ durch 1, dann ist dieses Integral identisch Null. Man subtrahiert daher im ursprünglichen Integral (4.12) 1 und entwickelt die Exponentialfunktion. Die entstehenden Terme können zu Oberflächenintegralen umgeformt werden. Diese verschwinden alle, falls das Potential genügend schnell abfällt im Unendlichen. Ein Diagramm mit V_M -Verbindung trägt somit nichts zu den Entwicklungen (4.5) und (4.6) bei.

Nichtverbundene Diagramme

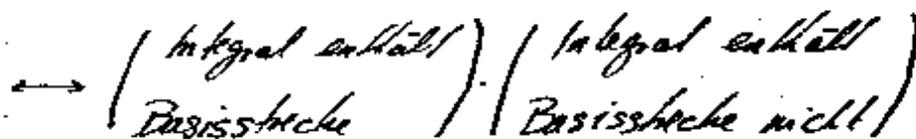
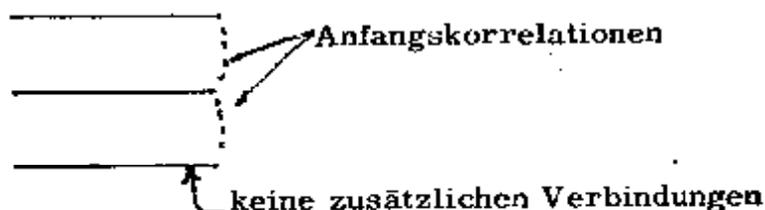


Diagramme ohne Basisstrecke enthalten aber V_M -Verbindungen, sind also identisch Null, oder sie sind von der Form



Dies entspricht Normierungsintegralen für μ^W , denn das typische Integral

$$\left(\int_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_r \\ \neq \mu_1, \dots, \mu_s}} d^3x_{\mu_1} \dots d^3x_{\mu_r} \text{ (nicht } \mu_1, \dots, \mu_s) \right) \left(\int_{\mu_1, \dots, \mu_s} d^3x_{\mu_1} \dots d^3x_{\mu_s} \right) \cdot \underbrace{\mu^{(r+s)}(x_{\mu_1}, \dots, x_{\mu_r}, x_{\mu_1}, \dots, x_{\mu_s})}_{\text{nichtverbundener Faktor}}$$

macht aus einer $(r+s)$ -Punkt-Dichtematrix eine r -Punkt-Dichtematrix. Man braucht also nur verbundene Diagramme zu betrachten.

Reduzibel verbundene Diagramme

$$\rightarrow \left(\begin{matrix} \text{ev. } v \\ \gamma, \delta, \dots \end{matrix} \right) \left(\int d^3x_{\mu} (\mu, \nu) \right) \left(\begin{matrix} \text{nicht } v \\ \gamma, \delta, \dots \end{matrix} \right)$$

Ein reduzibel verbundenes Diagramm liefert einen Faktor mit einer verbleibenden Variablen, oder ein Multiplum zur freien Zeitentwicklung der Basisstrecke, falls das Diagramm bis auf die Basisstrecke reduzibel ist.

Irreduzibel verbundene Diagramme

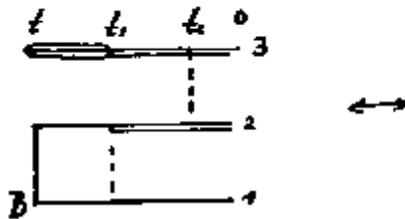
$$\rightarrow \left(\begin{matrix} \text{ev. } v \\ \gamma, \delta, \dots \end{matrix} \right) \left(\int d^3x_{\mu} (\nu, \mu) \right) \left(\begin{matrix} \text{sicher } v \\ \gamma, \delta, \dots \end{matrix} \right) \\ = \left(\begin{matrix} \text{ev. } v \\ \gamma, \delta, \dots \end{matrix} \right) \left(\int_{\mu} \dots [x_{\mu}] \text{ i.c.} \right) \left(\begin{matrix} \text{sicher } v \\ \gamma, \delta, \dots \end{matrix} \right) \\ = \text{Hauptwechselwirkung}$$

Für die folgende Diskussion sei das irreduzible G-Diagramm



$$e^{-L_0^{(10)} t} \left(\int d^3x_2 e^{-L_0^{(10)} t} \int d^3x_1 \int d^3x_0 \dots \right)$$

fest vorgegeben. Reduzible Erweiterung(en)



$$e^{L_0^{(1)} t} \int dx_2 e^{L_0^{(2)} t} \phi^{12}(t) \int dt_2 \phi^{23}(t_2)$$

$$\int dx_3 e^{L_0^{(3)}(t-t_1)} e^{L_0^{(3)} t_1} \int dt_2 \phi^{23}(t_2)$$

$$\underline{f_1^{(1)}(x_2; 0) \cdot f_2^{(2)}(x_2; 0) \cdot f_3^{(3)}(x_2; 0)}$$

+ alle weiteren bis auf Strecke 2 reduzierbaren Diagramme

Entsprechende Diagramme für $f_1^{(1)}(x_2; t_1)$

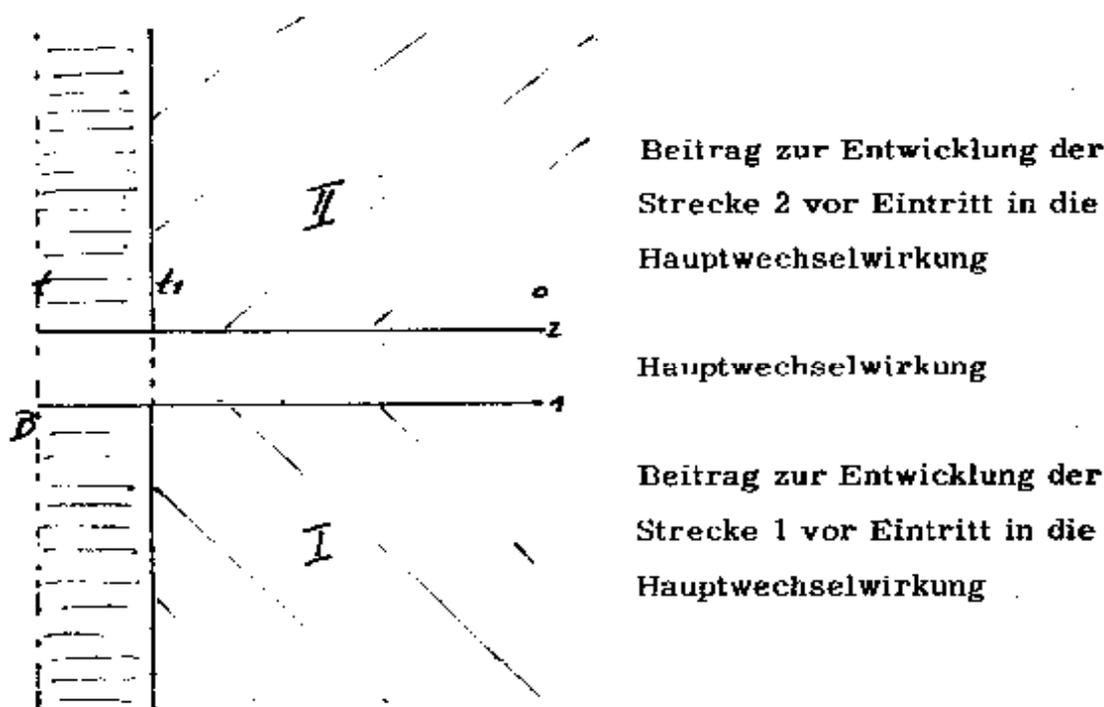
$$\begin{array}{c} t_1 \\ \hline B \end{array} \xrightarrow{0} e^{L_0^{(2)} t_1} f_1^{(2)}(x_2; 0)$$

$$\begin{array}{c} t_1 \quad t_2 \quad 0 \\ \hline B \end{array} \xrightarrow{2} e^{L_0^{(2)} t} \int dx_3 e^{L_0^{(3)} t} \int dt_2 \phi^{23}(t_2)$$

$$\cdot f_1^{(1)}(x_2; 0) \cdot f_2^{(2)}(x_2; 0)$$

+ alle weiteren bis auf die Basisstrecke-2
reduzierbaren Diagramme

Dasselbe Verfahren kann man für die Strecke 1 durchführen. Ein allgemeines reduzierbares Diagramm mit obigem irreduzierbarem Diagramm hat also die Form

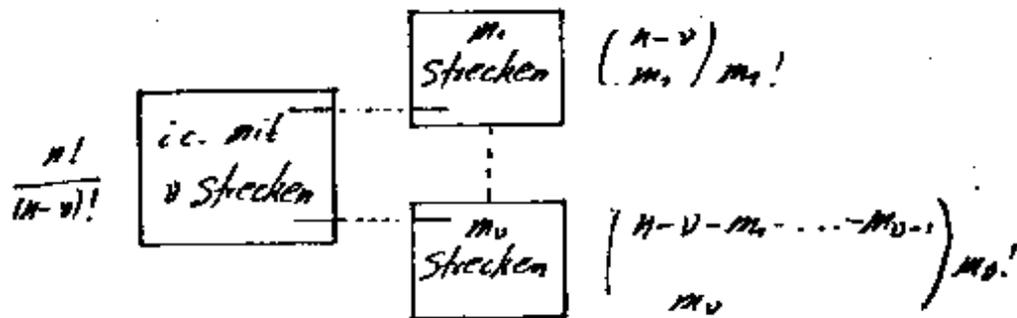


- Die beiden Blöcke I und II erhalten keine direkten Potentialverbindungen (sonst entstehen andere irreduzible Anteile).
- Die beiden Blöcke I und II sind von den Eintrittszeiten $t_{(1)}=t_1$ und $t_{(2)}=t_1$ der Strecken 1 und 2 in die Hauptwechselwirkung zu früheren Zeiten hin gestaffelt (sonst V_M -Verbindungen oder zusätzliche irreduzible Verbindungen)
- Die Zeitentwicklung von t_1 bis t (Faktoren der Form $d^3 x_3 e^{L \dots (t-t_1)}$...) liefert in reduzierten Faktoren keinen Beitrag, denn entwickelt man die Exponentialfunktion, dann bleibt die 1 stehen, alle übrigen Terme verschwinden wie in (4.12) als Oberflächenintegrale.
- Für Hauptwechselwirkungen mit ν Strecken entstehen Blöcke I... \underline{J} . Jeder Block hat die Struktur eines $f_1^w(x_j; t_j)$.
- Korrelationen im Hauptwechselwirkungsteil eines Diagramms können nicht reduzierbar erweitert werden. Solche Diagramme bleiben unbehandelt.
- Der kombinatorische Faktor für mögliche Indizierungen eines Diagramms mit ν Strecken im irreduziblen Teil und $m_1 \dots m_\nu$ zusätzlichen Strecken in den dazu reduzierten Blöcken ist

$$\binom{n}{v} v! \dots \binom{n-v-m_1-\dots-m_{v-1}}{m_v} m_v! = \binom{n}{v+m_1+\dots+m_v} (v+m_1+\dots+m_v)! \quad (4.14)$$

$\xrightarrow{n \rightarrow n} n$ $v+m_1+\dots+m_v$

denn man hat die Anzahl Möglichkeiten zu berechnen, wie n Indices an die folgende allgemeine Blockstruktur angebracht werden können



Nun betrachtet man

$$G = \int d^3x \delta^6(x-x_1) e^{L_0^{\omega}(1-x) t} \mu^{(1)}(x_1, t) \cdot \left\{ [\Phi^1]_{repr.} + \sum_{k=1}^{n-2} \int dt_1 \dots \int dt_k [\Phi^k]_{repr.} \cdot \Phi(t_1) \dots \Phi(t_k) \right\} + O(\Phi^{n-1}) \quad (4.15)$$

und strukturiert nach irreduzibel verbundenen (ic) Diagrammen um

$$G = \int d^3x \delta^6(x-x_1) e^{L_0^{\omega}(1-x) t} \mu^{(1)}(x_1, t) \cdot \left\{ [\Phi^1]_{repr.}^{ic} \left(1 + \sum_{k=1}^{n-2} (\text{zug. red. Erweiterungen}) \right) + \int (\text{weitere } [\dots]_{repr.}^{ic} (1 + \sum \text{zug. red. Erw.})) \right\} \mu^{(1)}(x_1, \dots, x_n, t) + O(\Phi^n) \quad (4.16)$$

Ein allgemeiner Term aus (4.16) hat die Form

$$\begin{aligned}
 & \int dx_1 \dots dx_n \delta(x-x_0) e^{\int_0^{\omega} \dots dt} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_{k-1}} dt_k \\
 & \cdot [\Phi^{\omega}(t_1) \dots \Phi^{\omega}(t_k)]_{repr.} \cdot \binom{n-1}{v-1} (v-1)! n^{-v} \frac{1}{n} \\
 & \sum_{\substack{0 \leq m_j \leq n-v \\ \sum_{j=1}^v m_j = n-v \\ \text{repr-graphs}}} \left(dx^{\sum_{j=1}^v m_j} e^{\int_0^{\omega} (y_1 \dots y_v) t} \right. \\
 & \cdot \left. \left\{ 1 + \sum_{k=2}^{n-2} \int_0^{t_k} dt_{k+1} \dots \int_0^{t_{k-1}} dt_k \right. \right. \\
 & \cdot [\Phi^{\omega}(t_{k+1}) \dots \Phi^{\omega}(t_k)]_{repr.} \\
 & \cdot \left. \left. \binom{n-v}{m_1} m_1! \dots \binom{n-v-m_{v-1}}{m_v} m_v! \right\} \right. \\
 & \cdot n^v \cdot \prod_{j=1}^v \left(\frac{(n-m_j-1)!}{n!} n^{m_j+1} f_{m_j+1}^{\omega}(y_1, x_{m_1}, \dots, x_{m_j}, \omega) \right) \\
 & + O(\Phi^n)
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

Die Entwicklung von $f_1^{\omega}(j)$ bis zur Ordnung $O(\Phi^{n-v-1})$ hat die Form

$$\begin{aligned}
 & f_j^{\omega}(x_j; t_j) = \\
 & = \sum_{\substack{0 \leq m_j \leq n-v \\ \text{repr-graphs}}} e^{\int_0^{\omega} (y) t_j} \int dx^{m_j} e^{\int_0^{\omega} (1 \dots m_j) t_j} \cdot n \\
 & \cdot \left\{ 1 + \sum_{j=2}^{n-v-2} \int_0^{t_j} dt_1 \dots \int_0^{t_{j-1}} dt_j [\Phi^{\omega}(t_1) \dots \Phi^{\omega}(t_j)]_{repr.} \right. \\
 & \cdot \left. \left. \binom{n-1}{m_j} m_j! \right\} \right. \\
 & \cdot \frac{(n-m_j-1)!}{n!} n^{m_j+1} f_{m_j+1}^{\omega}(x_j, x_{m_1}, \dots, x_{m_j}, \omega) \\
 & + O(\Phi^{n-v-1})
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

Ein Produkt von solchen $f_1^w(j)$ enthält viele Terme mit Ordnungen höher als $O(\phi^{n-v-1})$. Lässt man diese weg, dann erhält man bis zu dieser Ordnung

$$\begin{aligned}
 & \prod_{j=1}^v f_1^w(x_j; t_j) = \\
 & = n^{-v} \sum_{\substack{0 \leq m_j \leq n-v \\ \sum_{j=1}^v m_j \leq n-v \\ \text{repr. Graphs}}} \left(e^{L_0^w(1)t_1} \dots e^{L_0^w(v)t_v} \right. \\
 & \quad \left. \int dx^{m_1} \dots dx^{m_v} e^{L_0^w(v+1, \dots, (\sum_{j=1}^v m_j + v)t} \right. \\
 & \quad \left. \left\{ 1 + \sum_{k=1}^{n-2} \int dt_{k+1} \dots \int dt_k [\Phi(t_{k+1}) \dots \Phi(t_k)]_{\text{repr}} \right\} \right) \\
 & \quad \left(n \cdot \prod_{j=1}^v \binom{n-m_j-1}{m_j} f_{m_j+1}^w(x_j; x_{m_j}, \dots, x_{m_j}; 0) \right) \\
 & \quad + O(\phi^{n-v-1})
 \end{aligned} \tag{4.19}$$

Den Ausdruck in der runden Klammer von (4.17) kann man andererseits schreiben

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\substack{0 \leq m_j \leq n-v \\ \sum_{j=1}^v m_j \leq n-v \\ \text{repr. Graphs}}} \prod_{j=1}^v \left(dx^{m_j} e^{L_0^w(v+1, \dots, v+\sum_{j=1}^v m_j)t} \right. \\
 & \quad \left. \left\{ 1 + \sum_{k=1}^{n-2} \int dt_{k+1} \dots \int dt_k \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. [\Phi(t_{k+1}) \dots \Phi(t_k)]_{\text{repr}} \binom{n-v-\dots-m_j}{m_j} m_j! \right\} \right. \\
 & \quad \left. \cdot n \cdot \frac{(n-m_j-1)!}{m_j!} n^{m_j+1} f_{m_j+1}^w(x_j; x_{m_j}, \dots, x_{m_j}; 0) \right) \\
 & \quad + O(\phi^{n-v-1})
 \end{aligned} \tag{4.20}$$

und der allgemeine Term (4.17) wird mit (4.18) und (4.19)

$$\int d^3x_1 \dots d^3x_v \delta^{(v-r)} e^{L_0^{(r, v)} t} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_{k-1}} dt_k \cdot$$

$$[\Phi^{(1)}(x_1) \dots \Phi^{(r)}(x_r)]_{rep}^{cc} \quad (4.21)$$

$$\cdot n \prod_{j=1}^{v-r} \int e^{-L_0^{(j)} t_{ij}} f_j(x_j; t_{ij}) (1 + O(1/n))$$

Damit hat man schliesslich für den umgeordneten Stossterm (4.16)

$$G(p_1, q_1; t_1; f_1) =$$

$$= n \int d^3q_1 d^3q_2 d^3q_3 d^3q_4 \delta^{(3)}(q_1 - q_2) \delta^{(3)}(q_2 - q_1)$$

$$\cdot \Phi(q_1 - q_2) f_1(p_1, q_1; t_1) f_1(p_2, q_2; t_1) (1 + O(1/n))$$

$$+ \sum_{v=2}^{n-1} n^{v-2} \int \prod_{j=3}^v d^3q_j (d^3q_1 d^3q_2) \sum_{k=v-1}^{v-2} \int_0^t dt_1 \dots \int_0^{t_{k-1}} dt_k$$

$$\sum_{\substack{v-i < \\ graph}} [\Phi(q_1 - q_i) e^{L_0^{(i, v)} t} - L_0^{(i, p_i)} t_1 - L_0^{(i, p_i)} t_2 \Phi(q_{i+1} - q_{i+2})$$

$$\cdot e^{L_0^{(i, p_i)} t_1} \dots \cdot e^{-L_0^{(i, p_i)} t_2} \Phi(q_{i+2} - q_{i+1})$$

$$\cdot e^{L_0^{(i, p_i)} t_{v-i}}]_{rep}$$

$$\cdot \prod_{j=1}^v (e^{-L_0^{(j)} t_{ij}} f_j(p_j, q_j; t_{ij})) (1 + O(1/n))$$

$$+ O(n^{-1})$$

Die Indices

$$\alpha_1 \dots \alpha_d, p_1 \dots p_k \in \{1, \dots, v\}$$

$$\alpha_i \neq \beta_i \quad i=1 \dots d \quad (4.23)$$

sind so zu wählen, dass irreduzible Diagramme entstehen. Für den un-
behandelten Teil der Diagramme mit Anfangskorrelationen hat man

$$\begin{aligned}
 D\varphi_i g_j(t; \mu^{(0)}) = & \\
 & - \sum_{i \neq j} \int dx^3 \delta(x-x_i) e^{L_0^{(0)}(x, \mu) t} \\
 & \cdot \left\{ [\Phi^{(0)}(t) \mu^{(0)}(x_1 \dots x_{j-1}, 0)]^{i \cdot c} + \sum_{l=1}^{\infty} \int dt_1 \dots \int dt_{l-1} \right. \\
 & \left. [\Phi^{(0)}(t) \Phi^{(0)}(t_1) \dots \Phi^{(0)}(t_{l-1}) \mu^{(0)}(x_1 \dots x_{j-1}, 0)]^{i \cdot c} \right\}
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

und damit die Fujita-Gleichung

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} f_i^{(0)}(\varphi_i, g_j; t) = & \\
 = - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial g_j} f_i^{(0)}(\varphi_i, g_j; t) + & \\
 + G(\varphi_i, g_j; t; f_i^{(0)}) + D\varphi_i g_j(t; \mu^{(0)}) &
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

Mit der Fujita-Gleichung hat man (im Gegensatz zur Gleichung (3.7),
welche mit Term 4 nur eine allgemeine Ankopplung an Korrelations-
muster 3. Ordnung enthält) eine explizite Entwicklung in 2-er, 3-er,
... , j-er-Stöße. Im folgenden Abschnitt wird gezeigt, dass bei
Skalierung für den QM-Grad-Limes diese Terme mit Potenzen ϵ^{j-2}
behaftet sind. Diese formale ϵ -Abhängigkeit kennt man aus der Skalie-
rung der reduzierten QM-BBGKY-Hierarchie (2.25). (Für den Fall der
klassischen Hierarchie wird in (3) das Verschwinden solcher Terme im
Grad-Limes gezeigt).

4.2. Skalierung der Fujita-Gleichung und Limes zur Boltzmann-Gleichung

Nimmt man zur Zeit $t=0$ einen unkorrelierten Zustand an, dann hat man
für die skalierte Fujita-Gleichung

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} f_1^E(p, q; t) &= \\
 &= -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial q} f_1^E(p, q; t) + \\
 &+ n \epsilon \epsilon^2 \int d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 p_3 \delta^3(\frac{1}{2}\epsilon - q) \delta^3(p - p_1) \cdot \\
 &\cdot \left\{ \phi(q_1 - q_2) f_1^E(p_1, \epsilon q_1; t) f_1^E(p_2, \epsilon q_2; t) (1 + O(\frac{\epsilon}{v})) \right. \\
 &+ \sum_{\nu=2}^{\frac{d-1}{2}} (n_\nu \cdot \epsilon^3)^{\nu-2} \int \prod_{j=3}^{\nu} (d^3 p_j) \sum_{k=1}^{\frac{d-2}{2}} \int d\epsilon_k \int d\epsilon_{k+1} \\
 &\cdot \sum_{\substack{\nu \in \mathbb{N} \\ q_1, q_2 \in \mathbb{R}^d}} \left[\phi(q_1 - q_2) e^{L_0^{\omega, n}(t)} e^{L_0^{\omega, n}(p, t)} \right. \\
 &\quad \phi(p_1 - p_2) e^{L_0^{\omega, n}(p, t)} \dots e^{-L_0^{\omega, n}(p, t)} \\
 &\quad \left. \phi(q_1 - q_2) e^{L_0^{\omega, n}(p, t)} \right]_{\nu \in \mathbb{N}} \\
 &\cdot \left(\prod_{j=1}^{\nu} (e^{-L_0^{\omega, n}(t_j)} f_1^E(p_j, \epsilon q_j; t_j)) (1 + O(\frac{\epsilon}{v})) \right) \\
 &\quad + O(\epsilon^{\frac{d-1}{2}})
 \end{aligned} \tag{4.26}$$

wiederum mit den Indices (4.23) so gewählt, dass irreduzible Diagramme entstehen. Nimmt man vorerst an, dass Beiträge von Diagrammen mit $\nu > 2$ im Limes $\epsilon \rightarrow 0$ verschwinden, dann hat man (Die Fehler $O(\epsilon^2)$ und $O(\epsilon^{n\epsilon-1})$ werden im Folgenden unterdrückt)

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} f_1^E(p, q; t) &= \\
 &= -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial q} f_1^E(p, q; t) \\
 &+ n \epsilon \cdot \epsilon^2 \int d^3 p_1 d^3 p_2 d^3 p_3 \delta^3(\frac{1}{2}\epsilon - q) d^3 p_1 \delta^3(p - p_1)
 \end{aligned} \tag{4.27}$$

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \Phi(q_1 - q_2) \cdot f_1^\varepsilon(p_1, \varepsilon q_1, t) f_2^\varepsilon(p_2, \varepsilon q_2, t) + \right. \\
 & + \sum_{k=1}^{\infty} \int_{t_0}^{t_k} \dots \int_{t_{k-1}}^{t_k} [\Phi(q_1 - q_2) e^{L_0^{(12)}(t_k - t_1)} \\
 & \cdot \Phi(q_1 - q_2) e^{L_0^{(12)}(t_1 - t_2)} \dots e^{L_0^{(12)}(t_{k-1} - t_k)} \\
 & \left. \cdot \Phi(q_1 - q_2) \right] \cdot f_1^\varepsilon(p_1, \varepsilon q_1, t_k) f_2^\varepsilon(p_2, \varepsilon q_2, t_k) \Big\}
 \end{aligned} \tag{4.27}$$

Nun approximiert man wie in (3.6), (3.7)

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} f_1^\varepsilon(p_1, q_1, t) = \\
 & = -\frac{p_1}{m} \frac{\partial}{\partial q_1} f_1^\varepsilon(p_1, q_1, t) \\
 & + m \varepsilon^2 \int d^3 p_2 d^3 q_2 \Phi(\omega) \cdot \left\{ f_1^\varepsilon(p_1, q_1, t) f_2^\varepsilon(p_2, q_2 - \varepsilon \omega, t) + \right. \\
 & + \int d^3 q_1 d^3 q_2 \delta^3(q_1 - q_2) \delta^3(q_1 - \omega - q_2) d^3 p_2 \delta^3(p_2 - p_1) \\
 & \sum_{k=1}^{\infty} \int_{t_0}^{t_k} \dots \int_{t_{k-1}}^{t_k} [e^{L_0^{(12)}(t_k - t_1)} \Phi(q_1 - q_2) \dots \\
 & \dots e^{L_0^{(12)}(t_{k-1} - t_k)} \Phi(q_1 - q_2)] \cdot e^{L_0^{(12)} t_k} \\
 & \cdot e^{L_0^{(12)} t_0} f_1^\varepsilon(p_1, \varepsilon q_1, t) f_2^\varepsilon(p_2, \varepsilon q_2, t) \Big\}
 \end{aligned} \tag{4.28}$$

mit dem Fehler

$$\begin{aligned}
 & m \varepsilon^2 \int d^3 p_2 d^3 q_2 d^3 q_1 \delta^3(q_1 - q_2) \delta^3(q_1 - \omega - q_2) d^3 p_2 \delta^3(p_2 - p_1) \cdot \\
 & \sum_{k=1}^{\infty} \int_{t_0}^{t_k} \dots \int_{t_{k-1}}^{t_k} [\Phi(q_1 - q_2) e^{L_0^{(12)}(t_k - t_1)} \Phi(q_1 - q_2) \dots \\
 & \dots e^{L_0^{(12)}(t_{k-1} - t_k)} \Phi(q_1 - q_2)] \cdot
 \end{aligned} \tag{4.29}$$

$$\left\{ f_1^\varepsilon(p_1, \varepsilon q_1, t - \varepsilon t_1) f_2^\varepsilon(p_2, \varepsilon q_2, t - \varepsilon t_2) \right. \\ \left. - e^{-L_0^\omega(t_2 - t_1)} f_1^\varepsilon(p_1, \varepsilon q_1, t) f_2^\varepsilon(p_2, \varepsilon q_2, t) \right\} \quad (4.29)$$

In diesem Fehler iteriert man wie mit (3.9) und (3.10) in (3.7). Für den einfachsten Summanden erhält man

$$(N \varepsilon^3) \int d^3p_1 d^3p_2 d^3p_3 d^3q_1 d^3q_2 d^3q_3 \delta^3(p_1 - p_2) \\ \delta^3(p_2 - p_3) \delta^3(p_1 - p_3) \\ \int_{t_1}^{t_2} dt_2 \int_{t_1}^{t_2} dt_3 \left[\Phi(p_1 - q_1) e^{-L_0^\omega(t_2 - t_1)} \Phi(q_1 - q_2) \right. \\ \left. - e^{-L_0^\omega(t_2 - t_1)} \Phi(q_2 - q_3) \right] \quad (4.30)$$

$$f_1^\varepsilon(p_1, \varepsilon q_1, t - \varepsilon t_1) f_2^\varepsilon(p_2, \varepsilon q_2, t - \varepsilon t_1 - \varepsilon t_2) \\ - f_1^\varepsilon(p_2, \varepsilon q_2, t - \varepsilon t_1 - \varepsilon t_2)$$

Wie für (3.11) erwartet man, dass solch ein Term gegen Null geht im QM-Grad-Limes. Bis auf die Fehler hat man also die Gleichung (4.28) und mit der Entwicklung

$$e^{-L_0^\omega(t_2 - t_1)} = e^{-L_0^\omega(t_2 - t_1)} \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \int_{t_1}^{t_2} dt_1 \dots \int_{t_1}^{t_2} dt_k \Phi(t_1) \dots \Phi(t_k) \right] \quad (4.31)$$

kann man die Zeitentwicklung geschlossen schreiben und erhält wieder die Gleichung (3.13), also im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ die Boltzmann-Gleichung (3.31) bzw. (3.34).

5. Diskussion

5.1. Der Stossterm für den Fall von n gleichen quantenmechanischen Massenpunkten

Führt man die Herleitung der Boltzmann-Gleichung im Abschnitt 3 durch für den Fall von Bose-Statistik (Fermi-Statistik), dann hat man folgende Änderungen vorzunehmen:

1. Man hat μ^w zu ersetzen durch $\mu^{w\sigma} = (2\pi\hbar)^{-3n} (P^\sigma)^w$, mit P^σ der symmetrisierten (antisymmetrisierten) Dichtematrix. Im QM-Grad-Limes streben solche Verteilungen mit Bose-Statistik (Fermi-Statistik) gegen klassische Verteilungen mit Boltzmann-Statistik (z. B. (2.19))
2. Den Ansatz (3.1) hat man zu ersetzen (16) durch

$$S^\sigma(12) = \Theta(1|2) S^\sigma(1) S^\sigma(2) - \mathcal{J}^\sigma(12) \quad (5.1)$$

wobei man beispielsweise in Impulsdarstellung hat

$$\begin{aligned} & \langle p_1 - \frac{\hbar_1}{2}, p_2 - \frac{\hbar_2}{2} | \Theta(1|2) S_1^\sigma S_2^\sigma | p_1 + \frac{\hbar_1}{2}, p_2 + \frac{\hbar_2}{2} \rangle \\ &= \langle p_1 - \frac{\hbar_1}{2} | S_1^\sigma | p_1 + \frac{\hbar_1}{2} \rangle \langle p_2 - \frac{\hbar_2}{2} | S_2^\sigma | p_2 + \frac{\hbar_2}{2} \rangle \\ & - \Theta \langle p_1 - \frac{\hbar_1}{2} | S_1^\sigma | p_2 + \frac{\hbar_2}{2} \rangle \langle p_2 - \frac{\hbar_2}{2} | S_2^\sigma | p_1 + \frac{\hbar_1}{2} \rangle \end{aligned} \quad (5.2)$$

Dies führt in Gleichung (3.22) anstelle von

$$f_1^\sigma(q + \epsilon(\frac{x-y}{2}), p - \hbar_1 - \hbar_2) f_2^\sigma(q + \epsilon(\frac{x+y}{2}), p - \hbar_1 + \hbar_2) \quad (5.3)$$

auf

$$\begin{aligned} & f_1^\sigma(q + \epsilon(\frac{x-y}{2}), p - \hbar_1 - \hbar_2) f_2^\sigma(q + \epsilon(\frac{x+y}{2}), p - \hbar_1 + \hbar_2) \\ & \cdot [1 + (n_{1\epsilon})^3 n_\epsilon \Theta f_1^\sigma(q + \epsilon(\frac{x-y}{2}), p) \\ & + (n_{2\epsilon})^3 n_\epsilon \Theta f_2^\sigma(q + \epsilon(\frac{x+y}{2}), p - \hbar_2)] \end{aligned} \quad (5.4)$$

und die quantenstatistischen Effekte verschwinden wieder im Limes $\epsilon \rightarrow 0$, denn

$$\epsilon^3 n_\epsilon = (\epsilon^3 n) \cdot \epsilon \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0 \quad (5.5)$$

3. Den differentiellen Wirkungsquerschnitt (1.73) hat man zu ersetzen durch den differentiellen Wirkungsquerschnitt mit "Austausch"

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\psi, \psi, \psi}^{\text{a}} = |f_{\psi, \psi, \psi} + \theta f_{\psi, \psi, \psi}^{\text{a}}|^2 \quad (5.6)$$

Es gilt die Skalierungseigenschaft (2.8) d.h.

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\psi}^{\text{a}} = \epsilon^2 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\psi}^{\text{a}} \quad (5.7)$$

und die quantenmechanische Möglichkeit der Austauschwechselwirkung gleicher Massenpunkte bleibt im QM-Grad-Limes erhalten.

Kurz zusammengefasst hat man folgende Resultate:

Die Forderung der Invarianz des differentiellen Wirkungsquerschnittes bei Skalierung bringt eine Verallgemeinerung des Grad-Limes für die quantenmechanische Dynamik. In diesem Limes strebt (bis auf Fehlerterme) die erste Gleichung der QM-BBGKY-Hierarchie gegen eine quantenmechanische Boltzmann-Gleichung mit exaktem quantenmechanischem Wirkungsquerschnitt (inklusive Austauscheffekte bei gleichen Massenpunkten). Quantenstatistische Korrelationen werden vernachlässigbar, und man bekommt klassische Verteilungsfunktionen im Limes. Irreversibilität wird im Limes ($n \rightarrow \infty$) eingeführt durch eine implizite Kausalitätsforderung an die Lösung (3.5) der Gleichung (3.3) (19, 21).

5.2. Offene Probleme

Die Herleitung einer QM-Boltzmann-Hierarchie als Grenzfall der reduzierten QM-BBGKY-Hierarchie macht die genaue Kenntnis des quantenmechanischen Zeitevolutionsoperators (2.33) notwendig. Im Zusammenhang mit der Behandlung von Term (2.32) ergeben sich die folgenden konkreten Probleme

- Kann man im Fall "(b) $(p_{k+1}^i - p_i^i) \cdot \hat{c} > 0$ " eine Zeit t angeben nach der gilt $|q_{k+1}^i - q_i^i| > R_\epsilon$ und $(p_{k+1}^i - p_i^i)(q_{k+1}^i - q_i^i) < 0$ für eine gewisse Funktion $(t_{k+1}^w)(x_1^i \dots x_{k+1}^i)$.
- Kann man diese Zeit als Stosszeit interpretieren und gilt beispielsweise $t \rightarrow 0$ im Limes
- Sind $q_{k+1}^i, p_{k+1}^i, q_i^i, p_i^i$ durch die Stossabbildung gegeben, d.h. sind das auslaufende Phasenpunkte zu den einlaufenden Phasenpunkten $q_{k+1}^i, p_{k+1}^i, q_i^i, p_i^i$?

In der Herleitung der Boltzmann-Gleichung in den Abschnitten 3 und 4 hat man Terme vernachlässigt, die Ankopplungen an Korrelationsmuster höherer Ordnung beschreiben ((3.12), (3.13)), bzw. Ankopplung an 3-er, ... j-er-Stöße im Falle der Umformung zur Fujita-Gleichung (4.26). Es besteht das Problem diese Terme abzuschätzen. Zwar ist formal die Ankopplung der Korrelationsmuster proportional der Dichte ρ des Systems, also proportional ϵ und die Umordnung zur Fujita-Gleichung liefert sogar eine explizite Dichteentwicklung, d.h. die Integrale über j-er-Stöße sind proportional zu ϵ^{j-2} . Solche Integrale enthalten jedoch asymptotische Zeitentwicklungen, (z.B. den Zeitevolutionsoperator (2.33) in der Asymptotik t/ϵ). Dies führt eventuell dazu, dass die Integrale nicht wie $O(\epsilon)$ bzw. $O(\epsilon^{j-2})$ $j \geq 3$ verschwinden. Dasselbe Problem hat man für die Terme, die aus der markoffschen Approximation des Stossterms entstehen. Zwar hat man gezeigt, dass auch diese Terme formal proportional ρ sind, nicht aber explizit eine Ordnung $O(\epsilon)$ nachgewiesen.

Seit der Publikation einer quantenmechanischen Verallgemeinerung der Boltzmann-Gleichung durch Uhlenbeck und Uehling 1933 (22) hat es eine ganze Reihe von Versuchen gegeben, eine quantenmechanische Boltzmann-Gleichung herzuleiten aus der Schrödinger-Gleichung für ein System von n Massenpunkten (24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31). Es scheint allgemein akzeptiert (18), dass man die 1-Punkt-Verteilungsfunktion in der QM-Boltzmann-Gleichung als 1-Punkt-Wignerfunktion zu interpretieren hat. Damit gibt man die direkte klassische Interpretation als Wahrscheinlichkeitsdichte über dem Phasenraum auf und beschränkt

sich auf das Bilden von Erwartungswerten (23), die ja wie klassisch durch das Phasenraumintegral (1.16) gegeben sind. Dieser Punkt erscheint in etwas anderem Licht, falls man das System im QM-Grad-Limes betrachtet. Wegen $\hbar \rightarrow 0$ im Limes hat man eine klassische Interpretation der Verteilungsfunktion ((2.19), (2.22)), trotz quantenmechanischem Wirkungsquerschnitt im Stossterm. Es bleibt die Aufgabe diesen Uebergang mathematisch rigoros zu behandeln.

Literatur

- (1) Bogolubov, N.N., Problems of a Dynamical Theory
in Statistical Physics, übersetzt von E.K. Gora, in
Studies in Statistical Mechanics, Vol 1 (Boer, Uhlenbeck,
eds.), (Interscience, N.Y., 1962).
- (2) Born, M., und Green, H.S., Proc. Roy. Soc., A188(1946) 10.
- (3) Kirkwood, J.G., J. Chem. Phys. 14 (1946) 180.
- (4) Yvon, J., La théorie statistique des fluides et l'équation d'état
(Hermann et Cie., Paris 1935).
- (5) Grad, H., Principles of the Kinetic Theory of Gases, in Handbuch
der Physik, Band 12 (Flügge ed.) (Springer Verlag, Berlin,
1958)
- (6) Cercignani, C., On the Boltzmann Equation for Rigid Spheres in
Transport Theory and Statistical Physics, 2 (1972) 211.
- (7) Lanford, O.E., Lecture Notes from 1975, Band 38, Dynamical
Systems, Theory and Applications (ed Moser, Springer
Verlag, Berlin).
- (8) King, unveröffentlichte Dissertation
- (9) Duderstadt, J.J., William R.M., Transport Theory, (John Wiley &
Sons, New York 1979).
- (10) Résibois, P., De Leener, M., Classical Kinetic Theory of Fluids,
(John Wiley & Sons, New York 1977).
- (11) Chapman & Cowling, The Mathematical Theory of Non-uniform
Gases (Cambridge University Press 1939)
- (12) Keller, W.E., Helium-3 und Helium-4 (Plenum Press, New York
1969).
- (13) Hirschfelder, J.O., Curtiss, C.F., Bird, R.B., Molecular Theory
of Gases and Liquids, (John Wiley & Sons, New York 1954)
- (14) Wigner, E., Phys. Rev. 40, 749 (1932)
- (15) Imre, K., Ozizmir, E., Rosenbaum, M., Zweifel, P.F., Wigner
Method in Quantum Statistical Mechanics (Journal of
Mathematical Physics, vol. 8, number 5, 1097 (1967)).

- (16) Balescu, R., *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*, (John Wiley & Sons, New York, 1975).
- (17) Joachain, J., *Quantum Collision Theory* (North- Holland Publishing Company Amsterdam, 1975).
- (18) *Acta Physica Austriaca, Supplementum X, Proceedings of the International Symposium "100 Years Boltzmann Equation" in Vienna*, Springer Verlag, Wien New York 1973.
- (19) Schieve, W.C., *Lectures in Statistical Physics, Lecture Notes in Physics, Band 28* (Springer Verlag New York, 1974).
- (20) Fujita, S., *Introduction to Nonequilibrium Quantum Statistical Mechanics* (W. B. Saunders Company, 1966).
- (21) Leaf, B., Schieve W.C., *Reversibility of the Liouville Equation and the Approach to Equilibrium* (*Physica* 30², 1389, (1964)).
- (22) Uehling, E.A., Uhlenbeck, G.E., *Phys. Rev.* 43 (1933), 552.
- (23) Irving, J.H., Zwanzig, R.W., *The Statistical Mechanical Theory of Transport Processes. V. Quantum Hydrodynamics*, *The Journal of Chemical Physics*, 19, 1173 (1951).
- (24) Mori, H., Ono, S., *The Quantum-Statistical Theory of Transport Phenomena, I*, *Progress of Theoretical Physics, Vol 8* (1952), 327
- (25) Mori, H., Ono, S., *The Quantum-Statistical Theory of Transport Phenomena, III*, *Progress of Theoretical Physics, Vol 12* (1954), 113.
- (26) Ross, J., Kirkwood, J.G., *The Statistical-Mechanical Theory of Transport Processes. VIII. Quantum Theory of Transport in Gases*, *Journal of Chemical Physics, Vol 22* (1954), 1094.
- (27) Saenz, A.W., *Transport Equation in Quantum Statistics for Spinless Molecules*, *Physical Review, Vol 105*, 546 (1957).
- (28) Mori, H., Ross, J., *Transport Equation in Quantum Theory*, *Physical Review, Vol 109*, 1877 (1957).
- (29) Lewis, M.R., *Solution of the Equation of Statistical Mechanics*, *Journal of Mathematical Physics, Vol 2*, 222 (1961).
- (30) Lewis, M.R., *Quantum Statistics and the Boltzmann Equation* *Journal of Mathematical Physics, Vol 3*, 1229 (1962).

- (31) Hoffman, D. K., Müller, J. J., Curtiss, C. F., Quantum-Mechanical Boltzmann Equation, *Journal of Chemical Physics*, Vol 43, 2878 (1965).