

1 Elemente der klassischen Mechanik & Quantenmechanik

1.1. klassische Mechanik

Ein dynamisches System der klass. Mechanik wird beschrieben durch (verallgemeinerte) zeitabh. Koordinaten $q_1(t), \dots, q_n(t)$. Die Dynamik wird bestimmt durch die Lagrange-Funktion

$$L(q_i, \dot{q}_i, t) \quad (1.1)$$

mit $\dot{q}_i \equiv \frac{d}{dt} q_i$.

Das Wirkungsprinzip besagt, daß der tatsächliche dynamische Pfad des Systems ein Extremum der Wirkung ist und demgemäß die Variation der Wirkung um den klass. Pfad verschwindet,

$$\delta S = 0 \quad \text{mit} \quad S([q_i(t)]; t_1, t_2) = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt, \quad (1.2)$$

bei festgehaltenen Endpunkten.

Sei also eine Variation des klass. Pfades $q_i^{cl}(t)$ gegeben durch

$$q_i(t) = q_i^{cl}(t) + \delta q_i(t) \quad \text{mit} \quad \delta q_i(t_a) = 0 = \delta q_i(t_b), \quad (1.3)$$

dann gilt:

$$\begin{aligned} 0 = \delta S &= \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right\} \\ &= \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right] \delta q_i \right\} + \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i(t) \right|_{t_a}^{t_b} \quad (1.4) \end{aligned}$$

Mit (1.3) folgt für anderenfalls beliebige $\delta q_i(t)$:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \quad (\text{Euler-Lagrange Gleichungen}) \quad (1.5)$$

Zu vorgegebenen Anfangsbedingungen kann $q_i^{cl}(t)$ durch Integration von (1.5) bestimmt werden.

Alternativ kann die klass. Mechanik kanonisch oder Hamilton'sch formuliert werden; dazu definieren wir zunächst den kanonischen Impuls

$$p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}(q_i, \dot{q}_i, t). \quad (1.6)$$

Falls der "Hessian" $h_{ij}(q_i, \dot{q}_i, t) := \frac{\partial^2}{\partial \dot{q}_i \partial \dot{q}_j} L(q_i, \dot{q}_i, t)$ nicht singulär ist ($\det h \neq 0$), kann (1.6) implizit nach $\dot{q}_i$ aufgelöst werden,

$$\dot{q}_i = \dot{q}_i(q_i, p_i, t). \quad (1.7)$$

Mittels Legendre-Transformation erhält man aus L die Hamiltonfunktion

$$H(q_i, p_i, t) := p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t), \quad (1.8)$$

wobei mit (1.7) die Variablen durch q_i und p_i (und t) gegeben sind. Die kanonische Form der Wirkung lautet

$$S([q_i, p_i], t) = \int_{t_a}^{t_b} dt (p_i \dot{q}_i - H) \quad (1.9)$$

Das Wirkungsprinzip besagt nun

$$0 = \delta S = \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \delta p_i \dot{q}_i + p_i \delta \dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \delta p_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} \delta q_i \right\} \quad (1.10)$$

$$= \int_{t_a}^{t_b} dt \left\{ \left[\dot{q}_i - \frac{\partial H}{\partial p_i} \right] \delta p_i - \left[\dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial q_i} \right] \delta q_i \right\} + p_i(t_b) \delta q_i(t_b) - p_i(t_a) \delta q_i(t_a).$$

Mit $\delta q_i(t_a) = 0 = \delta q_i(t_b)$ (keine Einschränkung an δp_i !)
 folgen die kanonischen Bewegungsgleichungen

$$\dot{p}_i = - \frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}. \quad (1.11)$$

Der 2N-dim. Raum aller q_i, p_i heißt Phasenraum.

Läßt man Variationen der Endpunkte zu, $\delta q_i(t_{a,b}) \neq 0$,
 folgen wegen $\delta q_i, \delta p_i$ beliebig immer noch die jeweiligen
 Bewegungsgleichungen; die klass. Wirkung ist dann zwar
 nicht mehr invariant, $\delta S \neq 0$ i. A., aber die Änderung
 von S ist bestimmt durch die Variation der Endpunkte,

$$\delta S = p_i(t_b) \delta q_i(t_b) - p_i(t_a) \delta q_i(t_a).$$

Mit Hilfe der Poisson-Klammern $\{A, B\} := \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial p_i} \frac{\partial A}{\partial q_i}$
 mit den Eigenschaften

$$\{A, B\} = -\{B, A\} \quad (\text{anti-sym.}) \quad (1.12)$$

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0, \quad (\text{Jacobi-Id.})$$

lassen sich die kanon. Bewegungsgl. schreiben als

$$\frac{d}{dt} p_i = \{p_i, H\} \quad , \quad \frac{d}{dt} q_i = \{q_i, H\} . \quad (1.14)$$

Es gelten die fundamentalen Poisson-Klammern

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad , \quad \{p_i, p_j\} = 0 = \{q_i, q_j\} . \quad (1.15)$$

Die Formulierung mit Hilfe von Poisson-Klammern verdeutlicht die symplektische Struktur des Phasenraums.

1.2 Quantenmechanik

Ein dynamisches System der Quantenmechanik wird beschrieben durch einen (∞ -dim. i. d.) komplexen Vektor im Hilbert-Raum, $|\psi\rangle$ der die Bedeutung einer Wahrscheinlichkeitsamplitude hat.

Die Dynamik wird bestimmt durch den Hamilton-Operator $\hat{H}(\hat{q}, \hat{p})$, welches ebenso wie $\hat{q}$ und $\hat{p}$ hermitesch ist, $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$, $\hat{q}^\dagger = \hat{q}$, $\hat{p}^\dagger = \hat{p}$.

Die Zeitentwicklung eines Zustands (Wahrscheinlichkeitsamplitude) $|\psi(t)\rangle$ wird beschrieben durch die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}(\hat{q}, \hat{p}) |\psi(t)\rangle = i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle, \quad (1.16)$$

wobei Orts- und Impulsoperatoren die Kommutationsbeziehung

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0 = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] \text{ erfüllen.}$$

(Quantisierung kann dabei als axiomatische Ersetzung der Poisson-Klammern durch Kommutatoren verstanden werden).

Bezüglich einer Orts-Eigenbasis (im 3D Raum):

$$\hat{q}_i |\vec{q}\rangle = q_i |\vec{q}\rangle, \quad \langle \vec{q} | \vec{q}' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{q} - \vec{q}') \quad (1.17)$$

kann der Impulsoperator als Ableitung dargestellt werden,

$$\langle \vec{q} | \hat{p} = -i\hbar \vec{\partial} \langle \vec{q} | \quad (1.18)$$

Aus (1.18) folgt die Übergangsamplitude in dem Impulsraum $\langle \vec{q} | \vec{p} \rangle$:

$$\langle \vec{q} | \hat{p} | \vec{p} \rangle = -i\hbar \vec{\partial} \langle \vec{q} | \vec{p} \rangle = \vec{p} \langle \vec{q} | \vec{p} \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \vec{q} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{q} \cdot \vec{p}} \quad (1.19)$$

wobei die Normierung Konvention ist (in D Dimensionen: $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{D/2}}$)

Wichtig: Oben, ebenso wie im folgenden, sei angenommen, daß q_i Kartesische Koordinaten bezeichnet, und daß die Ordnung der Operatoren $\hat{q}$ und $\hat{p}$ in $\hat{H}(\hat{q}, \hat{p})$ eindeutig und physikalisch bestimmt ist (CAVE: $\mathbb{R}, p f(q) p \neq f(q) p^2$ i. A.)

Für einen Hamilton-Operator $\hat{H} = H(\hat{q}, \hat{p})$ ohne explizite Zeitabhängigkeit kann die Schrödinger-Gleichung integriert werden:

ein Zustand $|\psi(t_0)\rangle$ zum Zeitpunkt t_0 ist vollständig bestimmt durch vorgegebene Anfangswerte zum Zeitpunkt t_a über

$$|\psi(t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_0 - t_a)} |\psi(t_a)\rangle, \quad (1.20)$$

mit dem Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}(t_0, t_a) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_0 - t_a)} \quad (1.21)$$

$\hat{U}$ ist unitär, $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$, weil $\hat{H}$ hermitesch, und erhält damit die (Wahrscheinlichkeits-) Normierung von $|\psi(t)\rangle$: $1 = \|\psi(t_a)\rangle\|^2 = \|\psi(t_b)\rangle\|^2 = \left(\langle \psi(t_a) | \underbrace{\hat{U}^\dagger \hat{U}}_{=1} | \psi(t_a) \rangle \right)^{1/2}$ ✓

Für explizit zeitabh. Hamilton-Operator gilt immer noch

$$|\psi(t_b)\rangle = \hat{U}(t_b, t_a) |\psi(t_a)\rangle, \quad \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \quad (1.22)$$

mit

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \hat{T} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \hat{H}(t) \right\}, \quad t_b > t_a \quad (1.23)$$

Der Zeitordnungsoperator $\hat{T}$ ordnet beliebige Produkte eines Operators so, daß "spätere Zeiten links stehen":

$$\text{z.B. } \hat{T} \hat{O}(t_2) \hat{O}(t_1) = \begin{cases} \hat{O}(t_2) \hat{O}(t_1) & \text{für } t_2 > t_1 \\ \hat{O}(t_1) \hat{O}(t_2) & \text{für } t_1 > t_2 \end{cases} \quad (1.24)$$

Damit gilt zu vorgegebener Anfangsbed. $|\psi(t_a)\rangle$

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = i\hbar \partial_t \hat{U}(t, t_a) |\psi(t_a)\rangle$$

$$= \hat{T} \hat{H}(t) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^t dt \hat{H}(t) \right\} |\psi(t_a)\rangle$$

$$= \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_a) |\psi(t_a)\rangle$$

$$= \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle, \quad (1.25)$$

also die Schrödinger-Gleichung.

Eigenschaften des Zeitentwicklungsoperators:

a) Verknüpfung:

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \hat{U}(t_b, t') \hat{U}(t', t_a), \quad t' \in (t_a, t_b) \quad (1.26)$$

($\hat{U}$ ist Darstellung der abelschen Gruppe von Zeittranslationen)

Beweis:

$$\begin{aligned} \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t_b} dt \hat{H}(t)} \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t'} dt \hat{H}(t)} &= \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t_b} dt \hat{H}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t'} dt \hat{H}} \\ &= \hat{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \hat{H}} \end{aligned}$$

(... dank Zeitordnung nahezu trivial)

b) Unitarität

(1.26) verlangt, daß für anti-kausale Zeiten $t_b < t_a$ konsistent mit

$$\hat{U}(t_b, t_a) := \hat{U}(t_a, t_b)^{-1} \quad (1.27)$$

Wie für den kausalen Fall, folgt mit der Schrödinger-Gleichung die Darstellung des anti-kausalen Zeitentwicklungsoperators

9

$$\hat{U}(t_b, t_a) = \overset{\uparrow}{\hat{T}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt H(t)} \quad , t_b < t_a \quad (1.28)$$

Zeit-Antiordnung, damit $i\hbar \partial_{t_b} \hat{U}(t_b, t_a) = \hat{H}(t_b) \hat{U}(t_b, t_a)$

Es gilt:

$$[\hat{T}(\mathcal{O}(t_1) \mathcal{O}(t_2))]^\dagger = \overset{\hat{\dagger}}{\hat{T}}(\mathcal{O}^\dagger(t_2) \mathcal{O}^\dagger(t_1)) \quad (1.29)$$

(explizit nachprüfbar durch Fallunterscheidung), was sich direkt auf beliebige Produkte von Operatoren verallgemeinern lässt.

$$\Rightarrow \hat{U}(t_b, t_a) = \hat{U}^\dagger(t_a, t_b) \quad t_b < t_a \quad (1.30)$$

Vergleich mit (1.27): $\hat{U}(t_a, t_b)^{-1} = \hat{U}^\dagger(t_a, t_b)$

c) Schrödingers - Gleichung für $\hat{U}$

$$i\hbar \partial_t \hat{U}(t, t_a) = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_a) \quad (1.31)$$

$$i\hbar \partial_t \hat{U}(t, t_a)^{-1} = - \hat{U}(t, t_a)^{-1} \hat{H}(t)$$

↑
Zeit-Antiordnung!

Zeitentwicklungsoperator im Ortsraum:

$$\langle \vec{x}_b t_b | \vec{x}_a t_a \rangle := \langle \vec{x}_b | \hat{U}(t_b, t_a) | \vec{x}_a \rangle \quad (1.32)$$

"Propagator" oder Zeitentwicklungs-Amplitude

(erfüllt ebenso die Schrödinger-Gleichung)

Im Folgenden sind insbesondere Propagatoren von früheren zu späteren Zeiten relevant. Hilfreich ist dazu der kausale bzw. "retardierte" Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}_R(t_b, t_a) := \Theta(t_b - t_a) \hat{U}(t_b, t_a) \quad (1.33)$$

und der zugehörige retardierte Propagator

$$\langle \vec{x}_b t_b | \vec{x}_a t_a \rangle_R := \langle \vec{x}_b | \hat{U}_R(t_b, t_a) | \vec{x}_a \rangle. \quad (1.34)$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} & \langle \vec{x}_b | (\hat{H}(\vec{p}, \vec{q}, t_b) - i\hbar \partial_{t_b}) \hat{U}_R(t_b, t_a) | \vec{x}_a \rangle \\ &= \langle \vec{x}_b | \underbrace{(\hat{H}(-i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{x}_b}, \vec{x}_b, t_b) - i\hbar \partial_{t_b})}_{\substack{\uparrow \\ \partial_{t_b} \Theta(t_b - t_a)}} \underbrace{\langle \vec{x}_b t_b | \vec{x}_a t_a \rangle_R}_{\substack{\uparrow \\ \delta^{(3)}(\vec{x}_b - \vec{x}_a)}} \rangle \end{aligned} \quad (1.35)$$

Der retardierte Propagator ist also die Green'sche Funktion des Schrödinger-Operators.

Beispiel:

Propagator des freien Teilchens

Wir betrachten den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (1.36)$$

$\hat{H}$ ist diagonal im Impulsraum

$$\hat{H} |\vec{p}\rangle = \frac{\vec{p}^2}{2m} |\vec{p}\rangle \quad (1.37)$$

Der Propagator berechnet sich aus:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_b t_b | \vec{x}_a t_a \rangle &= \langle \vec{x}_b | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} (t_b - t_a)} | \vec{x}_a \rangle \\ &= \langle \vec{x}_b | e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} (t_b - t_a)} \underbrace{\int d\vec{p} |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}|}_{=1} | \vec{x}_a \rangle \\ &= \int d\vec{p} \langle \vec{x}_b | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{x}_a \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\vec{p}^2}{2m} (t_b - t_a)} \\ (1.18) \quad &= \underbrace{\int \frac{d\vec{p}}{(2\pi\hbar)^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x}_b - \vec{x}_a)} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\vec{p}^2}{2m} (t_b - t_a)}}_{(1.38)} \end{aligned}$$

Mit

$$\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{x}_b - \vec{x}_a) - \frac{i\hbar}{2m} \vec{p}^2 (t_b - t_a) = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\vec{p} - m \frac{\vec{x}_b - \vec{x}_a}{t_b - t_a} \right)^2 (t_b - t_a) + \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(\vec{x}_b - \vec{x}_a)^2}{t_b - t_a}$$

und $\vec{p}' = \vec{p} - m \frac{\vec{x}_b - \vec{x}_a}{(t_b - t_a)}$ folgt:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_b t_b | \vec{x}_a t_a \rangle &= e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(\vec{x}_b - \vec{x}_a)^2}{(t_b - t_a)}} \cdot \int \frac{d^D p'}{(2\pi\hbar)^D} e^{-\frac{i\hbar}{2m} (t_b - t_a) \vec{p}'^2} \\ &= \frac{1}{\left(\frac{2\pi i \hbar}{m} (t_b - t_a) \right)^{D/2}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(\vec{x}_b - \vec{x}_a)^2}{(t_b - t_a)}} \quad \text{für } t_b > t_a \end{aligned} \quad (1.39)$$

wobei wir das Fresnel-Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{(2\pi)^{1/2}} e^{i \frac{a}{2} p^2} = \frac{e^{\pm i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{|a|}} \quad \text{für } a \gtrless 0$$

(analytisch fortgesetztes Gauß-Integral) verwendet haben.

Check: im Limes $t_b \rightarrow t_a$ entspricht (1.39)

der Darstellung einer δ -Funktion

$$\lim_{t_b \rightarrow t_a} \langle \vec{x}_b t_b | \vec{x}_a t_a \rangle = \delta^{(D)}(\vec{x}_b - \vec{x}_a) \quad \checkmark$$