3. Beziehung zur Quantenmechanik

Sowohl der Lagrange- (Kap. 1) als auch der Hamilton-Formalismus (Kap. 2) besitzen konkrete Beziehungen zur Quantenmechanik. Beim Letzteren sind die Beziehungen einfach auszudrücken, obwohl „abstrakt" in ihrer Natur:

(i) Durch Ersatz $\{\,,\,\} \to \frac{1}{i\hbar}[\,,\,]$ erhält man aus Poisson-Klammern die Bewegungsgleichungen der Quantenmechanik im „Heisenberg-Bild".
1901-1976

Seite 33: $\frac{df}{dt} = \{f,H\} + \frac{\partial f}{\partial t} \;\longrightarrow\; \frac{d\hat{f}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{f},\hat{H}] + \frac{\partial \hat{f}}{\partial t}$.

(ii) Die kanonischen Transformationen des Hamilton-Formalismus (Seiten 34-36) sind mit den „unitären Transformationen" der Quantenmechanik verwandt.

$$\begin{tikzcd}
(q,p) \arrow[r, "\text{kanonische}", "\text{Transformation}"'] \arrow[d, "\text{Quantisierung}"'] & (Q,P) \arrow[d, "\text{Quantisierung}"] \\
(\hat{q},\hat{p}) \arrow[r, "\text{unitäre}", "\text{Transformation}"'] & (\hat{Q},\hat{P})
\end{tikzcd}$$

Beim Lagrange-Formalismus sind die Beziehungen mühsam herzuleiten, haben aber letztendlich eine einfache Interpretation und auch viele praktische Anwendungen. Im Folgenden betrachten wir diesen Fall.

3.1 Pfadintegral (Feynman 1948)

1918-1988

Betrachtet wird eine „Übergangsamplitude" bzw. ein „Propagator":

$$K(y,t_b;\, x,t_a) := \langle y \,|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_b-t_a)} \,|\, x \rangle .$$

Hier ist :

* $|x\rangle, |y\rangle$ = Eigenzustände des Ortsoperators, d.h. $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$, $\hat{x}|y\rangle = y|y\rangle$.

* $\hat{H}$ = Hamilton-Operator, d.h. $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x})$.

* $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_b-t_a)}$ = „Zeitentwicklungsoperator", d.h. unitäre Transformation, welche die Zeitentwicklung beschreibt.

Physikalisch gesehen stellt K die „Amplitude" dar, dass ein Teilchen, welches am Zeitpunkt $t=t_a$ beim x ist, am Zeitpunkt $t=t_b$ beim y zu finden ist. (Es ist zu bemerken, dass das Teilchen wegen der Unschärferelation am $t=t_a$ <u>keine</u> bestimmte Geschwindigkeit hat.)

Herleitung des Pfadintegrals

Grundidee: mehrfache Zerlegung des Zeitintervalls:

$$\langle y|\, \underset{t_b}{e^{-\frac{i\varepsilon \hat H}{\hbar}}} \;\; \underset{t_{N-1}}{e^{-\frac{i\varepsilon \hat H}{\hbar}}} \;\; \underset{t_{N-2}}{} \cdots \underset{t_2}{} \;\; \underset{t_1}{e^{-\frac{i\varepsilon \hat H}{\hbar}}} \,|x\rangle \;\; \underset{t_a}{}$$

$$\varepsilon := \frac{t_b - t_a}{N}$$

Zur Erinnerung (MMP III): $\mathbb{1} = \int dx\, |x\rangle\langle x| = \int \frac{dk}{2\pi}\, |k\rangle\langle k|$; $\langle x|k\rangle = e^{ikx}$.

Setze jetzt $\mathbb{1} = \int dx_i |x_i\rangle\langle x_i|$, $i = 1, \dots, N$, auf der rechten Seite jedes Operators, und $\mathbb{1} = \int \frac{dk_i}{2\pi} |k_i\rangle\langle k_i|$, $i = 1, \dots, N$, auf der linken Seite:

$|k_N\rangle\langle k_N|$ $\quad$ $|x_N\rangle\langle x_N|$ $\quad \dots \quad$ $|x_2\rangle\langle x_2|$ $|k_1\rangle\langle k_1|$ $\quad$ $|x_1\rangle\langle x_1|$

Gebraucht wird:

$$\langle x_{i+1}|k_i\rangle\langle k_i|\, e^{-\frac{i\varepsilon H(\hat p, \hat x)}{\hbar}}\, |x_i\rangle$$

$$= \langle x_{i+1}|k_i\rangle\langle k_i|\, \mathbb{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{\hat p^2}{2m} + U(\hat x)\right] + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\, |x_i\rangle$$

$$\overset{p = \hbar k}{=} \langle x_{i+1}|k_i\rangle\langle k_i|x_i\rangle \left\{1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} + U(x_i)\right] + \mathcal{O}(\varepsilon^2)\right\}$$

$$= \exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} - \frac{\hbar k_i}{\varepsilon}(x_{i+1} - x_i) + U(x_i) + \mathcal{O}(\varepsilon)\right]\right\}$$

„klassisch", d.h. keine Operatoren mehr

Setzt man alles zusammen, und eliminiert $\mathcal{O}(\varepsilon)$ durch $N \to \infty$, erhält man

$$K(y, t_b; x, t_a) = \lim_{N\to\infty} \int \prod_{i=1}^{N} \frac{dx_i\, dk_i}{2\pi}\, \delta(x - x_1)\, \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} \varepsilon \left[\frac{p_j^2}{2m} - p_j \frac{x_{j+1} - x_j}{\varepsilon} + U(x_j)\right]\right\}\Bigg|_{\substack{x_{N+1} := y \\ p_j := \hbar k_j}}$$

$$= \lim_{N\to\infty} \int \prod_{i=2}^{N} dx_i \prod_{i=1}^{N} \frac{dp_i}{2\pi\hbar}\, \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} \varepsilon \left[\frac{p_j^2}{2m} - p_j \frac{x_{j+1} - x_j}{\varepsilon} + U(x_j)\right]\right\}\Bigg|_{\substack{x_1 := x \\ x_{N+1} := y}}.$$

Symbolisch:

$$K(y, t_b; x, t_a) = \int_{x(t_a) = x}^{x(t_b) = y} \mathcal{D}x(t)\, \mathcal{D}\frac{p(t)}{2\pi\hbar}\, \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt' \left[\frac{p^2(t')}{2m} - p(t')\,\dot x(t') + U(x(t'))\right]\right\}.$$

„Funktionalintegral" = Integration über Funktionen $x(t) := \{x_2, \dots, x_N\}$ und $p(t) := \{p_1, \dots, p_N\}$.

bestimmtes Integral = Kontinuumlimes einer Summe

Ableitung = Kontinuumlimes einer Differenz

Die Impulsintegrationen sind quadratisch, und können durchgeführt werden:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \; e^{-\frac{ax^2}{2} \pm ibx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \; e^{-\frac{b^2}{2a}} .$$

Jetzt: $x \to p_j$; $a \to \frac{i\varepsilon}{\hbar m}$; $b \to \frac{x_{j+1}-x_j}{\hbar}$; und somit

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \; e^{-\frac{b^2}{2a}} \longrightarrow \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i \varepsilon}} \; \exp\left\{ i \, \frac{m (x_{j+1}-x_j)^2}{2\hbar\varepsilon} \right\} .$$

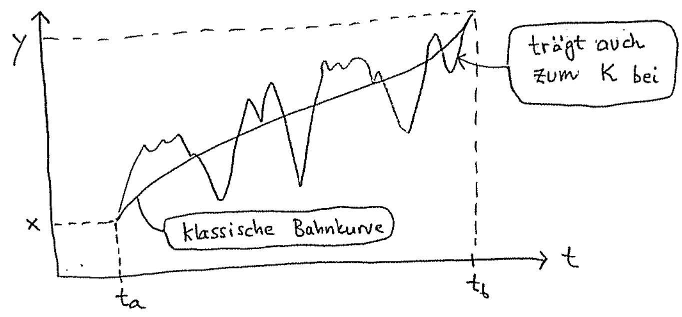
Als Endergebnis erhalten wir

$$K(y,t_b;x,t_a) = \lim_{N\to\infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \int \prod_{i=2}^{N} dx_i \; \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{N} \varepsilon \left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_{j+1}-x_j}{\varepsilon}\right)^2 - U(x_j) \right] \right\}_{\substack{x_1 := x \\ x_{N+1} := y}} .$$

Der Faktor $\left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}}$ ist divergent bei $N\to\infty$, aber <u>unabhängig vom Potential $U(x)$</u>. Wenn wir diesen Faktor als Bestandteil der Definition des Funktionalintegrationsmasses betrachten, erhalten wir die berühmten Feynman-Formeln:

$$\boxed{\begin{aligned} K(y,t_b;x,t_a) &= \int_{x(t_a)=x}^{x(t_b)=y} \mathcal{D}x(t) \; \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) && \text{„Pfadintegral"} \\ S &= \int_{t_a}^{t_b} dt \; L(x,\dot{x}) && \text{„Wirkung"} \\ L(x,\dot{x}) &= \frac{m\dot{x}^2}{2} - U(x) && \text{„Lagrange-Funktion"} \end{aligned}}$$

Nochmal graphisch:



In Worten: Skizziere beliebige Bahnkurve zwischen (x,t_a) und (y,t_b); bestimme die entsprechende Wirkung $S = \int_{t_a}^{t_b} dt \, L(x,\dot{x})$ [angenommen dass $\dot{x}(t)$ existiert, d.h. dass $x(t)$ differenzierbar ist]; bilde Phasenfaktor $\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)$; die Übergangsamplitude ist die Summe über alle solchen Phasenfaktoren (mal eine Konstante).

Klassischer Limes

Eine wichtige „Anwendung" des Pfadintegralformalismus besteht darin, dass das Hamiltonsche Prinzip (Seite 3) dadurch „intuitiv" verstanden werden kann.

Klassischer Limes := „$\hbar \to 0$" !

Unterschiedliche Bahnen ergeben unterschiedliche Wirkungen: $S[x+\delta x] \neq S[x]$.

Bei $\hbar \to 0$ führt dies zur destruktiven Interferenz, d.h.

$$e^{\frac{i}{\hbar}S[x]} + e^{\frac{i}{\hbar}S[x+\delta x]} + e^{\frac{i}{\hbar}S[x+\delta x']} + \ldots \overset{\hbar\to 0}{\approx} 0,$$

es sei denn, die Wirkungen sind ähnlich, d.h. S ist extremal um eine besondere Bahnkurve $x_{cl}(t)$:

$$S[x_{cl}+\delta x] = S[x_{cl}] + \mathcal{O}(\delta x)^2 .$$

Dann kann keine Kürzung stattfinden.

Die Extremalbedingung entspricht genau dem Hamiltonschen Prinzip $\delta S = 0$.

Höhere Ordnungen

„Taylor-Entwicklung" bzgl. δx

$$S[x_{cl}+\delta x] = S[x_{cl}] + \underbrace{\int_{t_a}^{t_b} dt \, \frac{\delta S[x_{cl}]}{\delta x_{cl}(t)}}\, \delta x(t) + \frac{1}{2}\int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^{t_b} dt' \, \frac{\delta^2 S[x_{cl}]}{\delta x_{cl}(t)\,\delta x_{cl}(t')}\, \delta x(t)\,\delta x(t') + \ldots$$

„Funktionalableitung":

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{S[x_{cl}+\varepsilon\,\delta_t] - S[x_{cl}]}{\varepsilon} = \frac{\partial L}{\partial x_{cl}} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{cl}}\right)$$

Aufgabe 11.1

Übergangsamplitude:

$$K = \int \mathcal{D}x \, e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

$$= \int \mathcal{D}x \, e^{\frac{i}{\hbar}\left[S_{cl} + \overset{0}{\widetilde{\int \frac{\delta S_{cl}}{\delta x}\delta x}} + \frac{1}{2}\iint \frac{\delta^2 S_{cl}}{\delta x\,\delta x'}\delta x\,\delta x' + \ldots\right]}$$

$$\approx e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}} \int \mathcal{D}x \, e^{\frac{i}{2\hbar}\iint \frac{\delta^2 S_{cl}}{\delta x\,\delta x'}\delta x\,\delta x'}$$

„klassische Antwort"

„die führenden Quantenkorrekturen"