27. Lösungen der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen als kanonische Transformationen

Der Zustand eines N-Teilchensystems wird durch einen Punkt $\xi_i = (p_1, \ldots, p_{3N}, q_1, \ldots, q_{3N})$ im $6N$-dimensionalen Phasenraum beschrieben, mit $d^{6N}\xi = d^{3N}p\, d^{3N}q$ als zugehörigem Volumenelement. In dieser Aufgabe soll gezeigt werden, dass die Lösungen $\xi_i = \xi_i(t, \xi_k^{(0)})$ der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen eine kanonische Transformation zwischen dem Anfangspunkt $\xi_k^{(0)} = \xi_k(0)$ und dem Endpunkt $\xi_i = \xi_i(t)$ darstellen. Um den Beweis stringent führen zu können, sind einige theoretische Vorkenntnisse von Nutzen, die in den folgenden Teilaufgaben erarbeitet werden sollen.

(a) Matrizen, $S \in \mathbb{R}^{(2d)\times(2d)}$ die der Bedingung

$$S^T J\, S = J \quad \text{mit} \quad J = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_d \\ -\mathbb{1}_d & 0 \end{pmatrix} = -J^T = -J^{-1}$$

genügen, werden als symplektisch bezeichnet. Zeigen Sie, dass die symplektischen Matrizen eine Gruppe bzgl. Matrixmultiplikation bilden, in der die Inverse durch $S^{-1} = J^T S^T J$ gegeben ist. Diese Gruppe wird gewöhnlich mit $\mathrm{Sp}(d, \mathbb{R})$ abgekürzt.

(2 Punkte)

(b) Verifizieren Sie, dass sich mit Hilfe der J-Matrix die Poisson-Klammer zweier Phasenraumfunktionen $f(p,q)$ und $g(p,q)$

$$\{f,g\}(p,q) = \sum_{i=1}^{3N} \left[\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial g}{\partial q_i} \frac{\partial f}{\partial p_i} \right] ,$$

sowie die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

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

umschreiben lassen zu

$$\{f,g\}(\xi) = -\sum_{i,k=1}^{6N} J_{ik} \frac{\partial f}{\partial \xi_i} \frac{\partial g}{\partial \xi_k} \quad \text{und} \quad \dot{\xi}_i = -\sum_{k=1}^{6N} J_{ik} \frac{\partial H}{\partial \xi_k} .$$

(2 Punkte)

(c) Eine Transformation $\xi_i = \xi_i(\xi_k^{(0)})$ der Phasenraumpunkte heißt kanonisch, wenn sie die Poisson-Klammern für *alle* Phasenraumfunktionen f und g invariant lässt, d.h. wenn entsprechend der Definition $f(\xi) = f^{(0)}(\xi^{(0)})$

$$\{f, g\}(\xi) = \left\{f^{(0)}, g^{(0)}\right\}(\xi^{(0)}) \quad \forall \quad f, g$$

gilt. Wir bezeichnen nun das Differential der Phasenraumtransformation durch die Matrix

$$S_{ik}(\xi^{(0)}) = \frac{\partial \xi_i}{\partial \xi_k^{(0)}} = \left(\frac{\partial \xi}{\partial \xi^{(0)}}\right)_{ik} .$$

Zeigen Sie damit:

$$\xi_i = \xi_i(\xi_k^{(0)}) \text{ ist kanonisch} \quad \Longleftrightarrow \quad S^T(\xi^{(0)})\, J\, S(\xi^{(0)}) = J\,.$$

(4 Punkte)

(d) Sei $\xi_i = \xi_i(t, \xi_k^{(0)})$ die Lösung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\xi}_i = -\sum_{k=1}^{6N} J_{ik} \frac{\partial H}{\partial \xi_k}$$

für die Anfangsbedingungen $\xi_k^{(0)}$. Beweisen Sie, dass die Matrix

$$S_{ik}(t, \xi^{(0)}) = \frac{\partial \xi_i(t, \xi_p^{(0)})}{\partial \xi_k^{(0)}}$$

der Differentialgleichung

$$\frac{dS_{il}}{dt} = -\sum_{j,k=1}^{6N} J_{ij}\ \frac{\partial^2 H}{\partial \xi_j \partial \xi_k}\bigg|_{\xi=\xi(\xi^{(0)})} S_{kl}(t, \xi^{(0)})$$

genügt.

(2 Punkte)

(e) Zeigen Sie damit, dass $S_{ik}(t, \xi_p^{(0)})$ für alle $t \geq 0$ eine symplektische Matrix ist, indem Sie die Ableitung des Produkts $S^T(t, \xi^{(0)})\, J\, S(t, \xi^{(0)})$ nach t betrachten. Begründen Sie, warum hiermit bewiesen ist, dass die Transformation $\xi_i = \xi_i(t, \xi_k^{(0)})$ für alle $t \geq 0$ kanonisch ist?

(3 Punkte)

28. Liouville-Gleichung

Analog zur letzten Aufgabe, sei mit $\xi_i = \xi_i(t, \xi_k^{(0)})$ die Lösung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\xi}_i = -\sum_{k=1}^{6N} J_{ik} \frac{\partial H}{\partial \xi_k}$$

zu den Anfangsbedingungen $\xi_k^{(0)}$ gegeben. Ferner beschreibe $\Gamma(t)$ die Phasenraumregion, die durch die zeitliche Evolution der Punkte der anfänglichen Phasenraumregion $\Gamma(0)$ entsteht.

(a) Beweisen Sie mit Hilfe des Resultats $S^T(t, \xi^{(0)})\, J\, S(t, \xi^{(0)}) = J$ aus der letzten Aufgabe das Liouvillsche Theorem , das besagt, dass das Phasenraumvolumen über $\Gamma(t)$ dem Phasenraumvolumen über $\Gamma(0)$ entspricht, d.h.

$$\int\limits_{\Gamma(t)} d^{6N}\xi = \int\limits_{\Gamma(0)} d^{6N}\xi^{(0)} = \text{const.}$$

(2 Punkte)

Bermerkung: Aus der Annahme der Konstanz des Integrals über die Phasenraumdichte $\rho(t, \xi)$ (Gesamtzahl der „Teilchen“ eines Ensembles innerhalb $\Gamma(t)$ soll erhalten bleiben)

$$\int\limits_{\Gamma(t)} \rho(t, \xi)\, d^{6N}\xi = \int\limits_{\Gamma(0)} \rho(0, \xi^{(0)})\, d^{6N}\xi^{(0)} = \text{const.}$$

folgt die Liouville-Gleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \{\rho, H\} = 0$$

als Evolutionsgleichung für die Phasenraumdichte $\rho(t, \xi)$.

(b) Wahrscheinlichkeitsamplitude für die quantenmechanische Zweiteilchen-Streuung (bonus)

In dieser Aufgabe wollen wir einen störungstheoretischen Ausdruck für die Wahrscheinlichkeitsamplitude $w_{\mathrm{f\,i}}$ der Zweiteilchenstreuung in einem kurzreichweitigen Wechselwirkungspotential $V(|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|)$ angeben. Der Gesamthamiltonian $H = H_0 + V$ beinhaltet neben dem Wechselwirkungspotential auch den Hamiltonian $H_0 = \frac{1}{2m}\left(|\vec{p}_1|^2 + |\vec{p}_2|^2\right)$ der freien Zeitentwicklung der beiden Teilchen. Wir nehmen an, dass der Anfangszustand der beiden Teilchen zur Zeit $t_0 = -T$ der Impulseigenzustand $|\psi(-T)\rangle = |\psi_{\mathrm{i}}\rangle = |\vec{p}_1, \vec{p}_2\rangle$ ist und interessieren uns dafür, mit welcher Wahrscheinlichkeit die beiden Teilchen nach der Streuung zur Zeit $t = T$ im Impulseigenzustand $|\psi(T)\rangle = |\psi_{\mathrm{f}}\rangle = |\vec{p}_1\,', \vec{p}_2\,'\rangle$ zu finden sind. Dabei gilt $H_0|\psi_{\mathrm{i,f}}\rangle = E_{i,f}|\psi_{i,f}\rangle$, wobei $E_i = \frac{1}{2m}(|\vec{p}_1|^2 + |\vec{p}_2|^2)$ und $E_f = \frac{1}{2m}(|\vec{p}_1\,'|^2 + |\vec{p}_2\,'|^2)$ die zugehörigen Energieeigenwerte des freien Hamiltonians sind. Ferner seien mit $|\psi_k\rangle$ die übrigen Energieeigenfunktionen zu H_0 bezeichnet, für die die Vollständig-keitsrelation $\sum_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \mathbb{1}$ gilt.

Bezeichnen wir mit $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$ den Zeitentwicklungsoperator der gesamten Dynamik, so lautet die Wahrscheinlichkeitsamplitude dieses Streuprozesses

$$w_{f\,i}(T) = \langle\psi_{\mathrm{f}}|U(T, -T)|\psi_{\mathrm{i}}\rangle = \langle\vec{p}_1\,', \vec{p}_2\,'|U(T, -T)|\vec{p}_1, \vec{p}_2\rangle\,. \tag{1}$$

Im Folgenden wollen wir die beiden führenden Terme dieser Wahrscheinlichkeitsamplitude in Störungstheorie bestimmen und zeigen, dass im Grenzfall $T \to \infty$ die Energieerhaltung $E_{\mathrm{f}} = E_{\mathrm{i}}$ folgt.

i. Zunächst ist es sinnvoll die triviale, freie Zeitentwicklung abzuspalten, indem man das Problem im sogenannten Wechselwirkungsbild betrachtet. Dazu definieren wir die Wellenfunktion $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ im Wechselwirkungsbild über $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\tilde{\psi}(t)\rangle$. Leiten Sie hieraus die Schrödingergleichung im Wechselwirkungsbild

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{V}(t)\,|\tilde{\psi}(t)\rangle \tag{2}$$

ab, wobei $\tilde{V}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\,V\,e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$.

(1 Punkt)

ii. Verifizieren Sie, dass $|\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{U}(t, t_0)|\tilde{\psi}(t_0)\rangle$ mit $\tilde{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty}\tilde{U}^{(n)}(t, t_0)$ und

$$\tilde{U}^{(n)}(t, t_0) = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \ldots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\,\tilde{V}(t_1)\,\tilde{V}(t_2)\ldots\tilde{V}(t_n) \tag{3}$$

eine formale Lösung der Schrödingergleichung im Wechselwirkungsbild, Glg. (2) (für beliebige Anfangswellenfunktionen $|\tilde{\psi}(t_0)\rangle$) ist.

(2 Punkte)

iii. Zeigen Sie, dass die sogenannte „diffraction function“ (Beugungsfunktion, sinc-Funktion)

$$\delta_{(\alpha)}(x) = \frac{\sin(\alpha x)}{\pi x}$$

in der Form $\delta_{(\alpha)}(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\alpha}^{\alpha} e^{ix\tau}\,d\tau$ geschrieben werden kann und somit im Grenzfall $\alpha \to \infty$ gegen die δ-Funktion strebt.

(1 Punkt)

iv. Für kurze Wechselwirkungszeiten genügt es, die Terme $\tilde{U}^{(1)}(t,t_0)$ und $\tilde{U}^{(2)}(t,t_0)$ in der formalen Lösung der Schrödingergleichung im Wechselwirkungsbild zu berücksichtigen und alle höheren Ordnungen zu vernachlässigen. Leiten Sie unter dieser Annahme mit $\langle\psi_\mathrm{f}|\psi_\mathrm{i}\rangle = \delta_\mathrm{fi}$ den Ausdruck

$$w_{f\,i}(T) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_\mathrm{f}-E_\mathrm{i})T}\left[\delta_\mathrm{fi} + \langle\psi_\mathrm{f}|\tilde{U}^{(1)}(T,-T)|\psi_\mathrm{i}\rangle + \langle\psi_\mathrm{f}|\tilde{U}^{(2)}(T,-T)|\psi_\mathrm{i}\rangle\right]\,,$$

für die Wahrscheinlichkeitsamplitude (1) ab, und zeigen Sie, dass

$$\langle\psi_\mathrm{f}|\tilde{U}^{(1)}(T,-T)|\psi_\mathrm{i}\rangle = -2\pi i\, V_\mathrm{fi}\,\delta_{(T/\hbar)}(E_\mathrm{f}-E_\mathrm{i})\,,$$

wobei wir die Matrixelemente des Wechselwirkungspotentials mit $V_{fi} = \langle\psi_\mathrm{f}|V|\psi_\mathrm{i}\rangle$ abgekürzt haben.

(2 Punkte)

v. Zeigen Sie entsprechend für $T \gg 1$, dass

$$\langle\psi_\mathrm{f}|\tilde{U}^{(2)}(T,-T)|\psi_\mathrm{i}\rangle \approx -2\pi i\left[\lim_{\varepsilon\to 0+}\sum_k \frac{V_\mathrm{fk}\,V_\mathrm{ki}}{E_\mathrm{i}-E_\mathrm{k}+i\varepsilon}\right]\delta_{(T/\hbar)}(E_\mathrm{f}-E_\mathrm{i})$$

indem Sie die folgende Relation verwenden

$$e^{-\frac{i}{\hbar}E_k(t_1-t_2)}\,\Theta(t_1-t_2) = -\frac{1}{2\pi i}\lim_{\varepsilon\to 0+}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}E(t_1-t_2)}}{E-E_k+i\varepsilon}\,dE\,.$$

(3 Punkte)

vi. Schließlich definieren wir die Übergangsmatrix $\mathcal{T}_{\mathrm{f\,i}}$ über den Zusammenhang

$$w_{\mathrm{f\,i}}(T) = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\mathrm{f}}-E_{\mathrm{i}})T}\left[\delta_{\mathrm{fi}} - 2\pi i\, \mathcal{T}_{\mathrm{f\,i}}\, \delta_{(T/\hbar)}(E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}})\right] \, .$$

Leiten Sie mit Hilfe der obigen Resultate ($T \gg 1$) und unter Verwendung der formalen Schreibweise

$$(E \cdot \mathbb{1} - \hat{H}_0 + i\varepsilon \cdot \mathbb{1})^{-1} = \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}$$

den folgenden Ausdruck für die Übergangsmatrix ab

$$\mathcal{T}_{\mathrm{f\,i}} = \lim_{\varepsilon \to 0+} \langle \psi_{\mathrm{f}} | V + V\, \frac{1}{E_{\mathrm{i}} - H_0 + i\varepsilon}\, V | \psi_{\mathrm{i}} \rangle \, .$$

Begründen Sie kurz, warum im Grenzfall $T \to \infty$ die Energieerhaltung $E_{\mathrm{f}} = E_{\mathrm{i}}$ erfüllt ist.

(2 Punkte)