DER ZEITENTWICKLUNGSOPERATOR

Aus den Quantenmechanikvorlesungen sind wir alle mit dem Formalismus Schrödingers und Heisenbergs aus den 1920er Jahren vertraut. Später argumentierte Dirac, dass sich die Quantenmechanik ebenso gut durch den Lagrangeformalismus beschreiben läßt. Das brachte ihn zu der Vermutung, dass der QM-Propagator zu dem Ausdruck $\exp(\mathrm{i}/\hbar S)$, der Wirkung entlang des klassichen Pfades,korrespondiert. Feynman leitete dies 1948 ebenfalls her. Er schrieb den Propagator als Summe über alle möglichen (auch nicht-klassischen) Pfade zwischen den Anfangs- und Endpunkten. In dieser Übung wollen wir uns mit dieser dritten Beschreibung der Quantenmechanik beschäftigen.

[H1] *Der Propagator in der Quantenmechanik* **[1+1+1+1 pts]**

Der Propagator $U(\vec{r},t;\vec{r}',t)$ ist nichts anderes als die Matrixelemente des Zeitentwicklungsoperators $\exp(-\mathrm{i}/\hbar\cdot H(t-t'))$ mit Ortseigenzuständen, d.h.,

$$U(\vec{r},t;\vec{r}',t') = \langle\vec{r}|\exp(-\mathrm{i}/\hbar\cdot H(t-t'))|\vec{r}'\rangle\,. \tag{1}$$

Die Wellenfunktion propagiert, d.h., man kennt ψ an allen Orten zu einer früheren Zeit und will daraus auf eine spätere Zeit schließen, dann wie folgt:

$$\psi(\vec{r},t) = \int \mathrm{d}^3r' U(\vec{r},t;\vec{r}',t')\psi(\vec{r'},t')\,. \tag{2}$$

Feynman zeigte, dass man den Propagator als Pfadintegral schreiben kann:

$$U(\vec{r},t;\vec{r}',t') = \int \mathcal{D}\vec{x}\exp(\mathrm{i}/\hbar\cdot S[\vec{x}])\,, \tag{3}$$

wobei die Integration $\mathcal{D}\vec{x}$ über alle Pfade $\vec{x}$ mit Endpunkt $\vec{x}(t)=\vec{r}$ und Anfangspunkt $\vec{x}(0)=\vec{r}'$ läuft und S die klassische Wirkung der Bahn ist.

(a) Warum erfüllt dieses $\psi(\vec{r},t)$ die Schrödingergleichung?

(b) (i) Warum gilt die "Anfangsbedingung": $\lim_{\epsilon\to 0} U(\vec{r},t+\epsilon;\vec{r}',t) = \delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}')$?

(ii) Zeige diese Eigenschaft explizit am Propagator des eindimensionalen freien Teilchens:

$$U(x,t;x',t') = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar(t-t')}}\exp\left(\frac{m}{2\hbar(t-t')}(x-x')^2\right)\,. \tag{4}$$

(c) Zeige die folgende Faktorisierung mittels eines intermediären Zeitpunktes T:

$$U(\vec{r},t;\vec{r}',t') = \int \mathrm{d}^3x U(\vec{r},t;\vec{x},T)U(\vec{x},T;\vec{r}',t')\,, \tag{5}$$

wobei $t > T > t'$.

(d) Argumentiere, warum der freie Propagator in n Dimensionen lautet:

$$U(\vec{x},t;\vec{x}',t') = \left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar(t-t')}\right)^{n/2}\exp\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar(t-t')}|\vec{x}-\vec{x}'|^2\right)\,. \tag{6}$$

[H2] *Doppelspaltexxperiment* **[2+1+1+1+1+2+2+2 pts]**

Betrachte einen Elektronenstrahl, der durch einen Doppelspalt (Abstand der Spalte $2a$) auf einen Schirm trifft, dessen Abstand von den Spalten L beträgt. Wegen der Symmetrie der Anordnung können wir zweidimensional rechnen, wobei die Dimension parallel zu den Spalten nicht betrachtet wird. Wir wählen zweidimensionale Koordinaten so, dass die Spalte bei $(0,\pm a)$ zu liegen kommen.

(a) Wir wollen annehmen, dass sich ein Elektron zum Zeitpunkt $t = 0$ bei $\vec{r} = (x, y)$ befindet und zum Zeitpunkt T auf den Schrim bei $\vec{r}' = (L, d)$ trifft, wobei d die Ablenkung auf dem Schirm vom Nullpunkt ist. Zeige mit Hilfe von **[H1]** für den Propagator:

$$\begin{aligned} &U((L,d),T;(x,y),0) \\ &= \left(\tfrac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar}\right)^2 \int_0^T \tfrac{\mathrm{d}\tau}{\tau(T-\tau)} \quad \Big[\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\tau}(x^2+(y-a)^2)} \cdot \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar(T-\tau)}(L^2+(d-a)^2)} \\ &\qquad\qquad + \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar\tau}(x^2+(y+a)^2)} \cdot \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar(T-\tau)}(L^2+(d+a)^2)}\Big] \,. \end{aligned} \tag{7}$$

(b) Diskutiere, inwieweit in diesem Pfadintegral aus (a) auch solche Pfade enthalten sind, bei denen die Elektronen mehrfach durch die Spalte laufen.

(c) Als Ausgangswellenfunktion bei $t = 0$ wählen wir eine ebene, rechtslaufende Welle

$$\psi((x,y),t=0) = \frac{1}{2\pi}\exp(\mathrm{i}kx) \tag{8}$$

in x-Richtung, d.h., einen monochromatischen, geradlinigen Elektronenstrahl. Warum liefert das Integral

$$\psi((L,d),T) = \int_0^T \mathrm{d}x\mathrm{d}y\, U((L,d),T;(x,y),0)\psi((x,y),0) \tag{9}$$

die Wellenfunktion auf dem Schirm zum Zeitpunkt $t = T$?

(d) Führe nun zunächst die Integration über y aus. Dabei erscheint ein Fresnelsches Integral vom Typ

$$\int \mathrm{d}y \exp(\mathrm{i}y^2) = (1+\mathrm{i})\sqrt{\pi/2}\,. \tag{10}$$

(e) Führe nun die Integration über x aus, dabei erscheint ein Gaußsches Integral vom Typ

$$\int \mathrm{d}x \exp(\mathrm{i}(x^2+\alpha x)) = (1+\mathrm{i})\sqrt{\pi/2}\exp(-\mathrm{i}\alpha^2/4)\,. \tag{11}$$

(f) Wir wollen $L \gg a, d$ annehmen, d.h., der Schirm steht weit weg und die Ablenkung ist klein. Zeige, dass sich nach Ausführung der Ortsintegrationen ergibt:

$$\psi((L,d),T) = \frac{m}{2\pi^2 \mathrm{i}\hbar}\int_0^T \frac{\mathrm{d}\tau}{T-\tau}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\hbar k^2}{2m}\tau\right)\exp\left(\mathrm{i}\frac{mL^2}{2\hbar(T-\tau)}\right)\cos\left(\frac{d\,a\,m}{\hbar(T-\tau)}\right)\,. \tag{12}$$

Schreibe diesen Ausdruck so um, dass im Integral nur noch die Variable $T - \tau$ auftritt, d.h., die Zeit, die das Elektron vom Spalt zum Schirm braucht.

(g) Um das Zeitintegral zu berechnen, schauen wir uns seine Struktur näher an. Der Hauptbeitrag zu den Integralen solcher oszillierender Funktionen kommt von der Stelle, wo die Frequenz klein wird (warum?). Wegen $L^2 \gg da$ dominiert die zweite Exponentialfunktion den Cosinus. Zeige, dass die Frequenz daher für $T - \tau = \frac{mL}{\hbar k}$ minimal wird und interpretiere dieses Resultat physikalisch.

(h) Wir ersetzen das Integral nun einfach durch den Funktionswert an der Extremalstelle aus (g). Dabei handeln wir uns einen Fehler (numerischen Faktor) der Größenordnung $\sqrt{\pi}$ ein. Zeige, dass sich dann für die Intensität ergibt (mit $\lambda = 2\pi/k$):

$$I = |\psi((L,d),T)|^2 = (\lambda\pi L)^{-2}\cos^2\left(\frac{2\pi a\,d}{\lambda L}\right)\,. \tag{13}$$

Diskutiere die Faktoren in dieser Formel und vergleiche das Ergebnis mit dem, was man bei Beugung von Licht der Wellenlänge λ am Doppelspalt erwartet.