

8 Dynamik von Wellen (Wellenfronten)

8.1 Der Hamilton-Jacobi-Formalismus

8.1.1 Welle-Teilchen Dualismus

Wir betrachten die Ausbreitung von Licht in einem Medium mit veränderlicher Lichtgeschwindigkeit. Es sei x_0 ein Punkt von dem ein Lichtstrahl ausgeht. Wie können uns einen weiteren Punkt x_1 wählen und den Weg, den das Licht zurückgelegt hat nach dem Fermatschen Prinzip als den Weg der kürzesten Zeit bestimmen.

Für alle x_0 bestimmen wir $S_{x_0}(x)$ als die Zeit, die das Licht nach dem Fermatschen Prinzip von x_0 nach x braucht.

Wir geben uns einen Zeitpunkt $t > 0$ vor und betrachten die Menge aller Punkte, die das Licht – nach dem Fermatschen Prinzip – in dieser Zeit, ausgehend vom Punkt x_0 gerade erreichen kann. $S_{x_0}(x)$ sei die kürzest mögliche Zeit von x_0 zum Punkt x . Die gesuchte Menge ist offenbar

$$\Phi_{x_0}(t) = \{x \mid S_{x_0}(x) \leq t\}$$

Sie (oder ihr Rand) wird **Wellenfront** genannt und ist wohl definiert. Es ist klar, daß $\Phi_{x_0}(t) \subset \Phi_{x_0}(t')$ für $t < t'$.

Die Grenze dieser Menge $\partial\Phi_{x_0}(t)$ würde man auf den ersten Blick als

$$\partial\Phi_{x_0}(t) = \{x \mid S_{x_0}(x) = t\}$$

definieren, was im allgemeinen aber falsch ist, da sich Lichtwege kreuzen können. Wir setzen diese Gleichheit deshalb voraus. Intuitiv kann man sich vorstellen, daß das für kleine Zeiten der Fall ist. Etwa wenn die Zeiten kleiner sind als das Licht von x_0 zu einem Spiegel benötigt.

Des weiteren nehmen wir an, daß sich die Wellenfronten monoton ausbreiten: Es sei $\Phi_{x_0}(s) \subset \Phi_{x_0}(t)$ für $s \leq t$. Außerdem soll sie keine Lücken haben: Es gebe zu jedem Punkt $x \in \Phi_{x_0}(t)$ einen Punkt $s \leq t$ mit $x \in \partial\Phi_{x_0}(s)$.

Wir betrachten jetzt einen Punkt x auf dem Rand dieser Menge (der eigentlichen Front) $\partial\Phi_{x_0}(t)$ und betrachten die Wellenfront $\Phi_x(s)$ für ein $s > 0$. Es gilt folgender

Satz (Huygenssches Prinzip): Nach Christiaan Huygens (1629–1695). Es gilt

$$\Phi_{x_0}(t+s) = \Phi_{x_0}(t) \bigcup \left(\bigcup_{x \in \partial\Phi_{x_0}(t)} \Phi_x(s) \right)$$

wobei $\Phi_{x_0}(t+s)$ die Wellenfront ist, die sich nach einer Zeit $t+s$ gebildet hat.

Beweis: Wir beweisen die Gleichheit der beiden Mengen $A = B$ durch den Beweis des Einschlusses in beide Richtungen:

$A \subset B$: **Bild!** Es sei $x_1 \in \Phi_{x_0}(t+s)$. Der Weg $x_0 \rightarrow x_1$ schneidet $\partial\Phi_{x_0}(t)$ in einem Punkt x_2 . Das Licht braucht für den Weg $x_0 \rightarrow x_2$ die Zeit t und folglich für den Weg $x_2 \rightarrow x_1$ die Zeit $(t+s) - t = s$. Damit ist $x_1 \in \Phi_{x_2}(s)$ und damit in der Vereinigung aller $\Phi_x(s)$.

$A \supset B$: **Bild!** Das beweisen wir indirekt. Wir nehmen an, daß es einen Punkt $x_2 \in \partial\Phi_{x_0}(t)$ gibt, zudem es einen Punkt $x_1 \in \partial\Phi_{x_2}(s)$ mit $x_1 \notin \partial\Phi_{x_0}(t+s)$ gibt. Das heißt, die beiden Wellenfronten $\partial\Phi_{x_0}(t+s)$ und $\partial\Phi_{x_2}(s)$ berühren sich nicht sondern schneiden sich. Der Weg $x_0 \rightarrow x_2 \rightarrow x_1$ schneide $\partial\Phi_{x_0}(t+s)$ in einem Punkt $x_3 \in \Phi_{x_2}(s)$. Es gibt also ein $s' < s$, sodaß der Weg $x_0 \rightarrow x_2 \rightarrow x_3$ in kürzerer Zeit, nämlich $s' + t < s + t$ zurückgelegt werden kann. Das ist aber ein Widerspruch zu $x_3 \in \partial\Phi_{x_0}(t+s)$. \square

Damit können wir den Prozeß der Lichtausbreitung auf zwei Weisen beschreiben:

- 1) Als Teilchenstrahlen (kürzeste Lichtausbreitungswege): Der Weg wird lokal definiert durch das gegebene Geschwindigkeitsfeld, d.h., die lokale Geschwindigkeit des Lichtes als Teilchen
- 2) Als Wellen: Bewegung von Wellenfronten.

Das Huygensssches Prinzip sagt aus, daß sich Wellenfronten wie Halbgruppen verhalten oder – mit anderen Worten – ein Markowprinzip erfüllen.

Es ist klar, daß diese Art der Beschreibungen nichts damit zu tun hat, daß es sich um “Licht” handelt. Alle materiellen Objekte, die sich mit einer Geschwindigkeit ausbreiten, lassen sich so beschreiben. Bei materiellen Teilchen ist die lokale Art der Ausbreitung offensichtlich und scheinbar eindeutig. Keiner kommt auf die Idee, etwa eine Billiardkugel als Welle zu beschreiben. Möchte man dennoch mechanische Bewegungen als Welle beschreiben, ist die Frage, welche Größe man als Wellenfront interpretieren kann. Dazu bietet sich die Wirkung – also das Zeitintegral über der Lagrangefunktion – an. Dem Prinzip der kleinsten Wirkung entspricht dann das Fermatsche Prinzip.

Zur Illustration betrachten wir das Problem im zweidimensionalen euklidischen Raum $x \in \mathbb{R}^2$. Für festen Zeitpunkt t ist die Menge $\partial\Phi_{x_0}(t) = \{x | S_{x_0}(x) = t\}$ eine Isolinie der Funktion $S_{x_0}(x)$. Im 2-D können wir uns $S_{x_0}(x)$ als Paraboloid im \mathbb{R}^3 über \mathbb{R}^2 vorstellen und $\partial\Phi_{x_0}(t)$ als Projektion der Isolinie $S_{x_0}(x) = t$ auf den \mathbb{R}^2 . Für ein $t' > t$ befindet sich im \mathbb{R}^3 die Isolinie $S_{x_0}(x) = t'$ oberhalb der Isolinie $S_{x_0}(x) = t$. Die Projektion der Isolinien in den \mathbb{R}^2 erscheint als eine sich ausbreitende Wellenfront. Die Richtung dieser Ausbreitung im \mathbb{R}^2 entspricht der Projektion des Gradienten von $S_{x_0}(x)$ (der Gradient steht senkrecht auf der Isolinie!). Wir nennen ihn $p = \partial_x S_{x_0}(x)$. Je steiler der Gradient ist, desto näher sind die Wellenfronten aneinander. Im allgemeinen ist $p \neq \dot{x}$, d.h. die Richtung der Ausbreitung der Wellenfront muß nicht mit der Richtung der Teilchenbewegung übereinstimmen. Schon aus formalen Gründen geht das nicht, denn $p \in \mathcal{X}^*$ und $\dot{x} \in \mathcal{X}$. **Bild!**

8.1.2 Bemerkungen

- Kirchhoff hat bewiesen, daß man das Huygenssche Prinzip aus den Maxwellgleichungen folgern kann.
- Ein Lichtstrahl ist die Spur oder Trajektorie eines fiktiven Teilchens. Und umgekehrt: Die Trajektorie eines realen Teilchens hat eine virtuelle Wellenfront.
- $\Phi_{x_0}(t + s)$ ist die Einhüllende aller $\Phi_x(s)$.
- Die Wellenfront erfüllt das Markow- oder Halbgruppenprinzip. Das deutet darauf hin, daß sie eine Gleichung der Form $\frac{d}{dt}\Phi_{x_0}(t) = \mathbf{A}(\Phi_{x_0}(t))$ erfüllen sollte mit einem im allgemeinen nichtlinearen Generator \mathbf{A} . So eine Gleichung gibt es. Sie heißt Hamilton-Jacobi-Gleichung.

8.1.3 Formale Herleitung der Hamilton-Jacobi-Gleichung

Bevor wir zur exakten Herleitung der Hamilton-Jacobi-Gleichung führen wir eine sehr grobe Herleitung an, wie sie häufig in Lehrbüchern vorzufinden ist.

Wir definieren eine Funktion (Wirkung)

$$S(x, t) = \int_0^t L(x(t'), \dot{x}(t')) dt'$$

und leiten für sie eine Gleichung her.

Als erstes erhalten wir unter Benutzung der Lagrangegleichung

$$\partial_x S(x, t) = \int_0^t \partial_x L(x(t'), \dot{x}(t')) dt' = \int_0^t \frac{d}{dt} \partial_{\dot{x}(t')} L(x(t'), \dot{x}(t')) = \partial_{\dot{x}(t)} L(x(t), \dot{x}(t)) = p$$

Weiter ist einerseits (falls $p = \partial_{\dot{x}} L(x, \dot{x})$)

$$\frac{dS}{dt} = L(x, \dot{x}) = \langle \dot{x}, p \rangle - H(p, x)$$

und andererseits

$$\frac{dS}{dt} = \partial_t S(x, t) + \langle \dot{x}, \partial_x S(x, t) \rangle$$

Hier haben wir benutzt, daß $x = x(t)$ explizit von der Zeit abhängt (was wir im Integral aber übergangen haben). Hieraus folgt

$$0 = \partial_t S(x, t) + \langle \dot{x}, \partial_x S(x, t) \rangle - \langle \dot{x}, p \rangle + H(p, x)$$

setzt man hier $p = \partial_x S(x, t)$ ein, erhält man

$$0 = \partial_t S(x, t) + H(\partial_x S, x)$$

die Hamilton-Jacobi-Gleichung.

Diese Herleitung exakt, sieht so aus:

8.1.4 Definition der Wirkung als Wellenfront

Wir betrachten jetzt die Dynamik eines physikalischen Systems – etwa eines Teilchens – und fragen, ob es möglich ist, auch für ein Teilchen soetwa wie eine Wellenfront zu definieren und möglicherweise dafür eine Gleichung herzuleiten.

Als Analogie zum Fermatschen Prinzip des zeitlich kürzesten Weges bietet sich das Prinzip der kleinsten Wirkung an. Als “Wellenfront” können wir die Punkte betrachten, die von einem Punkt aus mit derselben Wirkung erreicht werden. D.h., die Wellenfront ist eine Funktion vom Anfangs- und Endpunkt. Diese “Wellenfront” definieren wir ausgehend vom Lagrangeformalismus in folgenden Schritten:

1. Gegeben sei eine Lagrangefunktion $L(x, y)$ und Anfangsposition $x(t_0) = x_0$ und Anfangsgeschwindigkeit $\dot{x}(t_0) = v_0$ unseres Teilchens.
2. Die Trajektorie des Teilchens, also die Kurve, die das Wirkungsfunktional minimiert, genügt der Lagrangegleichung

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{x}} L(x(t), \dot{x}(t)) - \frac{\partial}{\partial x} L(x(t), \dot{x}(t)) = 0$$

Unter recht allgemeinen Voraussetzungen läßt sich stets eine eindeutige Lösung dieses Anfangswertproblems finden.

Die Lösung $x(t)$ hängt von den Parametern der Aufgabe ab, also

$$x(t) = x(t; t_0, x_0, v_0)$$

Das ist eine Trajektorie, die ein Teilchen beschreibt, daß zum Zeitpunkt t_0 mit definierten Ortkoordinaten und Geschwindigkeit losgeschickt wurde.

3. Uns interessieren Trajektorien, die im Punkt (x_0, t_0) starten und einen bestimmten Punkt x_1 zum Zeitpunkt t_1 erreichen. D.h., wir müssen die Geschwindigkeit v_0 so festlegen, daß dieser Punkt erreicht wird, also die Gleichung

$$x_1 = x(t_1; t_0, x_0, v_0) \tag{57}$$

bezüglich v_0 lösen. Angenommen, diese Gleichung läßt sich lösen. Wir erhalten eine Lösung $v_0(t_0, x_0; t_1, x_1)$. In die ursprüngliche Lösung eingesetzt, erhalten wir die Trajektorie

$$X(t; t_0, x_0; t_1, x_1) = x(t; t_0, x_0, v_0(t_0, x_0; t_1, x_1))$$

Diese Trajektorie verbindet die Punkte (x_0, t_0) und (x_1, t_1) und ist Lösung eines Randwertproblems für die Lagrange Gleichung (und ist unter Umständen der Weg mit der kleinsten Wirkung). Im Gegensatz zum Anfangswertproblem muß dieses Randwertproblem keine eindeutige Lösung besitzen. Diese Frage ist äquivalent zur Frage, ob die Gleichung (57) eine eindeutige Lösung besitzt. Mit anderen Worten ist das die Frage, ob es nur einen Weg mit kleinster Wirkung gibt, der die Punkte (x_0, t_0) und (x_1, t_1) verbindet.

Handelt es sich um Licht, ist klar, daß das nicht der Fall sein muß. Ein typisches Beispiel sind Kaustiken, die durch Spiegelung an gebeugten Flächen entstehen.

Wir nehmen im weiteren an, ohne diese Frage näher zu untersuchen, daß die Lösung des Randwertproblems eindeutig ist. Wir haben die Hoffnung, daß das z.B. der Fall ist, wenn sich t_1 nicht weit von t_0 entfernt ist.

Bemerkung: Die Minimalität des Wirkungsfunktional wird nie benutzt. Es wird stets nur angenommen, daß die reale Trajektorie die Lagrange Gleichung erfüllt. Das ist auch der Fall, wenn die reale Trajektorie nicht ein Extremal des Wirkungsfunktional ist. Das ist der Grund, warum der Hamilton-Jacobi-Formalismus auch dann angewendet werden kann, wenn (57) eigentlich nicht eindeutig lösbar ist.

Wie oft in der Physik leiten wir unter speziellen Bedingungen eine Gleichung her, die wir dann in allen Fällen, in denen sie und ihre Lösung einen Sinn haben, anwenden, auch wenn das Fälle sind, für die die Herleitung nicht gerechtfertigt ist.

4. Die Trajektorie $X(t; t_0, x_0; t_1, x_1)$ hat folgende Eigenschaften, die zum Teil offensichtlich sind oder die man sich leicht klar machen kann. Zu beachten ist, daß $X, x_1 \in \mathcal{X}$, sodaß im

Fall, daß $t; t_0, x_0; t_1$ fest sind, $X : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$. Damit ist die Frechetableitung $\frac{\partial}{\partial x_1} X : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$ ein linearer Operator.

$$\begin{aligned}
 X(t; t_0, x_0; t_1, x_1) \Big|_{t=t_0} &= x_0 \\
 X(t; t_0, x_0; t_1, x_1) \Big|_{t=t_1} &= x_1 \\
 \frac{\partial}{\partial x_1} X(t; t_0, x_0; t_1, x_1) \Big|_{t=t_0} &= \frac{\partial}{\partial x_1} X(t_0; t_0, x_0; t_1, x_1) = \frac{\partial}{\partial x_1} x_0 = \mathbf{O} \\
 \frac{\partial}{\partial x_1} X(t; t_0, x_0; t_1, x_1) \Big|_{t=t_1} &= \frac{\partial}{\partial x_1} X(t_1; t_0, x_0; t_1, x_1) = \frac{\partial}{\partial x_1} x_1 = \mathbf{I} \\
 \frac{\partial}{\partial t_1} X(t; t_0, x_0; t_1, x_1) \Big|_{t=t_0} &= \frac{\partial}{\partial t_1} X(t_0; t_0, x_0; t_1, x_1) = \frac{\partial}{\partial t_1} x_0 = 0 \\
 \frac{\partial}{\partial t_1} X(t; t_0, x_0; t_1, x_1) \Big|_{t=t_1} &= -\frac{\partial}{\partial t} X(t; t_0, x_0; t_1, x_1) \Big|_{t=t_1} = -v_1
 \end{aligned}$$

Die letzte Gleichung kann man sich schnell an einem Bild klarmachen. **(Bild!)** Wir betrachten X zu drei Zeiten $t = t_1 - \varepsilon, t_1, t_1 + \varepsilon$. Außerdem betrachten wir eine andere Lösung $X(t; t_0, x_0; t_1 - \varepsilon, x_1)$, für die der Punkt x_1 zur Endzeit $t_1 - \varepsilon$ erreicht wurde. Dann ist $X(t_1 - \varepsilon; t_0, x_0; t_1 - \varepsilon, x_1) = x_1$. Wir nehmen an, daß diese Trajektorie für $t = t_1$ etwa (modulo kleiner Unterschiede bezüglich ε) denselben Punkt erreicht hat, wie $X(t; t_0, x_0; t_1, x_1)$ zum Zeitpunkt $t = t_1 + \varepsilon$. Es sei also

$$X(t_1 + \varepsilon; t_0, x_0; t_1, x_1) = X(t_1; t_0, x_0; t_1 - \varepsilon, x_1) + o(\varepsilon)$$

Dann erhält man

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t_1} X(t; t_0, x_0; t_1, x_1) \Big|_{t=t_1} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} (X(t_1; t_0, x_0; t_1, x_1) - X(t_1; t_0, x_0; t_1 - \varepsilon, x_1)) = \\
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} (X(t_1; t_0, x_0; t_1, x_1) - X(t_1 + \varepsilon; t_0, x_0; t_1, x_1)) = \\
 &= -\frac{\partial}{\partial t} X(t; t_0, x_0; t_1, x_1) \Big|_{t=t_1} = -v_1
 \end{aligned}$$

5. Ausgehend von der Lösung $X(t; t_0, x_0; t_1, x_1)$ berechnen wir die Wirkung

$$S(t_1, x_1; t_0, x_0) = \int_{t_0}^{t_1} L(X(t; t_0, x_0; t_1, x_1), \dot{X}(t; t_0, x_0; t_1, x_1)) dt$$

Das ist die tatsächliche Wirkung unserer realen Trajektorie. Sie ist also das Minimum über alle virtuellen Trajektorien. Wie erwähnt benutzen wir das nicht sondern benutzen nur die Lagrangeleichung. Ganz genau formuliert, bedeutet das: $L(x, y)$ ist gegeben. Es sei $A(x, y) = \frac{\partial}{\partial y} L(x, y)$, $B(x, y) = \frac{\partial}{\partial x} L(x, y)$. In A und B setzen wir die reale Trajektorie ein. Es sei

$$\begin{aligned}
 a(t) &:= A(X(t; t_0, x_0; t_1, x_1), \dot{X}(t; t_0, x_0; t_1, x_1)) \\
 b(t) &:= B(X(t; t_0, x_0; t_1, x_1), \dot{X}(t; t_0, x_0; t_1, x_1))
 \end{aligned}$$

(die Abhängigkeiten von $t_0, x_0; t_1, x_1$ in a und b seien weggelassen).

Die Lagrangeleichung lautet jetzt:

$$\frac{d}{dt}a(t) - b(t) = 0$$

Der Satz: “ $X(t; t_0, x_0; t_1, x_1)$ erfülle die Lagrangeleichung”, bedeutet: Wenn man mit X die angegebene Procedure ausführt, und dann $a'(t) - b(t)$ berechnet, kommt 0 raus.

8.1.5 Exakte Herleitung der Hamilton-Jacobi-Gleichung

Im weiteren suchen wir eine Gleichung, der die Funktion $S(t_1, x_1; t_0, x_0)$ für variable Werte t_1, x_1 und feste Werte t_0, x_0 genügt. Dazu berechnen wir die partiellen Ableitungen von S bezüglich t_1 und x_1 . Wir erhalten:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_1} S &= L(X(t_1; t_0, x_0; t_1, x_1), \dot{X}(t_1; t_0, x_0; t_1, x_1) + \\ &+ \int_{t_0}^{t_1} \left[\left\langle \frac{\partial}{\partial t_1} X, \partial_1 L \right\rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t_1} \dot{X}, \partial_2 L \right\rangle \right] dt = \\ &= L(x_1, v_1) + \int_{t_0}^{t_1} \left[\left\langle \frac{\partial}{\partial t_1} X, \partial_1 L \right\rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t_1} \dot{X}, \partial_2 L \right\rangle \right] dt \end{aligned}$$

Hier ist mit $\partial_1 L$ und $\partial_2 L$ die Gateaux-Ableitung von L bezüglich des ersten bzw. zweiten Argumentes gemeint. Anschließend werden dort die Argumente X bzw. \dot{X} eingesetzt. Beide Ausdrücke sind Funktionale aus \mathcal{X}^* , die mit Elementen aus \mathcal{X} gepaart werden.

Im weiteren wird verwendet, daß X die Lagrangeleichung erfüllt. Deshalb kann anstelle von $\partial_1 L$ auch $\frac{d}{dt} \partial_2 L$ gesetzt werden. Mit der formalen Gleichung $\partial_1 L = \frac{d}{dt} \partial_2 L$ ist ja $0 = \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{X}} L - \frac{\partial}{\partial X} L$, also die Lagrangeleichung gemeint.

Außerdem wird $\dot{X} = \frac{d}{dt} X$ und $\frac{\partial}{\partial t_1} \dot{X} = \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial t_1} X$ benutzt. Das ergibt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_1} S &= L(x_1, v_1) + \int_{t_0}^{t_1} \left[\left\langle \frac{\partial}{\partial t_1} X, \partial_1 L \right\rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t_1} \dot{X}, \partial_2 L \right\rangle \right] dt = \\ &= L(x_1, v_1) + \int_{t_0}^{t_1} \left[\left\langle \frac{\partial}{\partial t_1} X, \frac{d}{dt} \partial_2 L \right\rangle + \left\langle \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial t_1} X, \partial_2 L \right\rangle \right] dt = \\ &= L(x_1, v_1) + \int_{t_0}^{t_1} \frac{d}{dt} \left\langle \frac{\partial}{\partial t_1} X, \partial_2 L \right\rangle dt = \\ &= L(x_1, v_1) + \left\langle \frac{\partial}{\partial t_1} X, \partial_2 L \right\rangle \Big|_{t=t_1} - \left\langle \frac{\partial}{\partial t_1} X, \partial_2 L \right\rangle \Big|_{t=t_0} = \\ &= L(x_1, v_1) - \langle v_1, p(t_1) \rangle - \langle 0, p(t_1) \rangle = -H(p_1, x_1) \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde verwendet, daß $\frac{\partial}{\partial \dot{X}} L$ gerade der Impuls an der Stelle $X(t_1; t_0, x_0; t_1, x_1)$ ist, also $p(t_1)$. Wir setzen $p_1 = p(t_1)$.

Als nächstes berechnen wir die partielle Ableitung von S bezüglich x_1 und machen weitgehend die selben Umformungen. Dabei beachten wir, daß die partielle Frechet-Ableitung $\frac{\partial}{\partial x_1} X : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$

ein linearer Operator ist, dessen adjungierte $\left[\frac{\partial}{\partial x_1} X\right]^* : \mathcal{X}^* \rightarrow \mathcal{X}^*$ bei der Kettenregel auf das entsprechende Funktional (Gateaux-Ableitung) wirkt.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial x_1} S &= \int_{t_0}^{t_1} \left[\left[\frac{\partial}{\partial x_1} X \right]^* \partial_1 L + \left[\frac{\partial}{\partial x_1} \dot{X} \right]^* \partial_2 L \right] dt = \\
 &= \int_{t_0}^{t_1} \left[\left[\frac{\partial}{\partial x_1} X \right]^* \frac{d}{dt} \partial_2 L + \left[\frac{\partial}{\partial x_1} \dot{X} \right]^* \partial_2 L \right] dt = \\
 &= \int_{t_0}^{t_1} \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial}{\partial x_1} X \right]^* \partial_2 L dt = \\
 &= \left[\frac{\partial}{\partial x_1} X \right]^* \partial_2 L \Big|_{t=t_1} - \left[\frac{\partial}{\partial x_1} X \right]^* \partial_2 L \Big|_{t=t_0} = \mathbf{I}^* p(t_1) - \mathbf{O} p(t_1) = p_1
 \end{aligned}$$

Setzt man jetzt diesen Ausdruck für p_1 in $H(p_1, x_1)$ oben ein, erhält man abschließend

$$0 = \frac{\partial}{\partial t_1} S + H \left(\frac{\partial}{\partial x_1} S, x_1 \right)$$

Hier ist $S = S(t_1, x_1; t_0, x_0)$ eine Funktion von vier Größen, von denen die beiden letzten Parameter sind und die beiden ersten Variable bezüglich derer die partiellen Ableitungen gebildet werden. Die Parameter lassen wir weg und beiden Variablen lassen wir die Indizes weg. Es sei also im weiteren $S = S(x, t) = S(t, x; t_0, x_0)$. Dazu ist ein Anfangswert $S(x, t_0) = S_0(x)$ vorzugeben. Damit erhalten wir folgendes zu lösendes Problem:

$$\begin{aligned}
 0 &= \partial_t S(x, t) + H \left(\frac{\partial}{\partial x} S(x, t), x \right) \\
 S(x, 0) &= S_0(x)
 \end{aligned}$$

Diese Gleichung heißt **Hamilton-Jacobi-Gleichung**. Sie ist eine nichtlineare partielle Differentialgleichung erster Ordnung.

Hier haben wir einen allgemeinen Anfangswert $S_0(x)$ eingeführt. Ursprünglich sind wir von einem Teilchen, das im Punkt x_0 startet ausgegangen. Bevor wir untersuchen, was für eine Funktion $S_0(x)$ in diesem Fall gesetzt werden muß und in welchem Sinne wir von allgemeinen Anfangswerten $S_0(x)$ sprechen können, betrachten wir ein Beispiel.

8.2 Explizite Lösung der HJE fürs potentialfreie Teilchen

Wir betrachten den Fall der Bewegung eines Teilchens ohne äußeres Potential, also die Lagrange-funktion $L(x, y) = T(y)$ mit einer glatten und konvexen Funktion T mit $T'(0) = T(0) = 0$, deren konvex adjungierte $T^*(p)$ die Rolle der kinetischen Energie spielt. Der Hamiltonian ist in diesem Fall $H(p, x) = T^*(p)$.

Der potentialfrei Fall ist physikalisch wenig interessant. Aus mathematischer Sicht stellt er aber eine interessante Aufgabe dar, die für in viele Bereiche der Mathematik als Illustration dient. Die HJE in diesem Fall wird auch state-independent HJE genannt. Das “state-independent” bezieht sich darauf, daß $H(p, x)$ nicht von Zustand x abhängt.

Bevor wir Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$\begin{aligned} 0 &= \partial_t S(x, t) + T^* \left(\frac{\partial}{\partial x} S(x, t) \right) \\ S(x, 0) &= f(x) \end{aligned}$$

mit einem allgemeinen Anfangswert lösen, berechnen wir für ein potentialfreies Teilchen mit Anfangsort x_0 die Wirkung. Diese sollte äquivalent zur Lösung der HJE mit dem $S(x, 0) = \chi_{\{x_0\}}(x)$ sein.

8.2.1 Die explizite Berechnung der Wirkung

Die Lagrange-gleichung ist

$$0 = \frac{d}{dt} T'(\dot{x}) = T''(\dot{x}) \ddot{x}$$

Das führt auf die allgemeine Lösung (weil $T'' > 0$)

$$x(t) = (t - t_0)v_0 + x_0$$

Das ist die Lösung des Anfangswertproblems. Wir suchen mit seiner Hilfe die Lösung des Randwertproblems. D.h., wir suchen das v_0 , sodaß $x(t_1) = x_1$ gilt. Das ergibt sich aus der Gleichung

$$(t_1 - t_0)v_0 + x_0 = x_1$$

Es existiert eine eindeutige Lösung

$$v_0 = \frac{x_1 - x_0}{t_1 - t_0}$$

Das ergibt für die Wirkung

$$S(x_1, t_1; x_0, t_0) = \int_{t_0}^{t_1} T(\dot{X}(t)) dt = T \left(\frac{x_1 - x_0}{t_1 - t_0} \right) (t_1 - t_0)$$

Im weiteren setzen wir $x_1 = x$ und testen, ob diese Größe die Hamilton-Jacobi-Gleichung erfüllt, die in diesem Fall folgende Form hat:

$$0 = \partial_t S(x, t) + T^* (\partial_x S(x, t))$$

Wir haben

$$\begin{aligned}\partial_t S(x, t) &= T\left(\frac{x-x_0}{t-t_0}\right) - \frac{x-x_0}{t-t_0} T'\left(\frac{x-x_0}{t-t_0}\right) = -T^*\left(T'\left(\frac{x-x_0}{t-t_0}\right)\right) \\ \partial_x S(x, t) &= T'\left(\frac{x-x_0}{t-t_0}\right)\end{aligned}$$

Hierbei wurde die Darstellung der Legendretransformation

$$T^*(T'(\xi)) = \xi T'(\xi) - T(\xi)$$

benutzt.

Um die Rolle des Anfangswertes zu verstehen, untersuchen wir in $S(x_1, t_1; x_0, t_0)$ den Grenzwert $t_1 \rightarrow t_0$. Offensichtlich ist dieser Ausdruck singulär. Im Fall $x_1 = x_0$ gilt $S(x_1, t_1; x_0, t_0) = 0$ für alle t_1 . Falls $x_1 \neq x_0$ geht das Argument in T gegen ∞ , wird aber mit einem linearen Ausdruck $(t_1 - t_0) \rightarrow 0$ multipliziert. Da T konvex ist, und deshalb stärker als linear wächst, geht das Produkt insgesamt aber gegen ∞ . Wir haben also abschließend

$$S(x_0) = S(t_0, x_1; t_0, x_0) = \chi_{x_0}(x_1)$$

Das kann man physikalisch so verstehen. $S(t_0, x_1; t_0, x_0) = 0$ ist die Wirkung, die nötig ist, um das System vom Punkt x_0 zum Punkt x_1 zu überführen – ohne das Zeit vergeht. Diese Wirkung kann nur 0 werden für $x_1 = x_0$ ansonsten sollte sie ∞ sein.

8.2.2 Die Hopfsche Lösungsmethode

Eberhard Frederich Ferdinand Hopf (Hopf-Bifurkationen, Wiener-Hopf-Methode) entwickelte folgende Methode zur Lösung der Hamilton-Jacobi-Gleichung im potentialfreien Fall.

Zur Lösung der Gleichung

$$\begin{aligned}0 &= \frac{\partial}{\partial t} S(x, t) + T^*\left(\frac{\partial}{\partial x} S(x, t)\right) \\ S(x, 0) &= S_0(x)\end{aligned}$$

wird die Hilfsfunktion

$$v_{y,q}(x, t) = S_0(y) + \langle x - y, q \rangle - (t - t_0)T^*(q)$$

betrachtet. Offensichtlich ist

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} v_{y,q}(x, t) &= -T^*(q) \\ \frac{\partial}{\partial x} v_{y,q}(x, t) &= q\end{aligned}$$

Damit ist $v_{y,q}(x, t)$ für alle y, p Lösung der Gleichung. Allerdings ist der Anfangswert nicht erfüllt. Es ist

$$v_{y,q}(x, 0) = S_0(y) + \langle x - y, q \rangle$$

Es müssen jetzt die Werte y und q so gewählt werden, daß $v_{y,q}(x, 0) = S_0(x)$. Offensichtlich ist $y = x$. Aber damit wird q nicht festgelegt, was bedeutet, daß $v_{y,q}(x, t)$ nicht eindeutig ist.

Eine Möglichkeit, y und q festzulegen, liefert die Formel aus der konvexen Analysis

$$\inf_y \sup_q (S_0(y) + \langle x - y, q \rangle) = \inf_y (S_0(y) + \chi_{\{0\}}(x - y)) = S_0(x)$$

Damit erhalten wir als Lösung

$$\begin{aligned} S(x, t) &= \inf_y \sup_q v_{y,q}(x, t) = \inf_y \sup_q (S_0(y) + \langle x - y, q \rangle - (t - t_0)T^*(q)) = \\ &= \inf_y \left(S_0(y) + (t - t_0) T \left(\frac{x - y}{t - t_0} \right) \right) \end{aligned}$$

8.2.3 Die Probe

Wir machen für $\mathcal{X} = \mathbb{R}_1$ die Probe:

$$S(x, t) = \inf_y \left(S_0(y) + (t - t_0) T \left(\frac{x - y}{t - t_0} \right) \right) \quad (58)$$

Das inf wird an der Stelle y angenommen, die Lösung der Gleichung

$$S'_0(y) - T' \left(\frac{x - y}{t - t_0} \right) = 0 \quad (59)$$

ist. Angenommen, diese Gleichung läßt sich bezüglich y auflösen. Die Lösung sei $y = g(x, t)$. Dann ist

$$S(x, t) = S_0(g(x, t)) + (t - t_0) T \left(\frac{x - g(x, t)}{t - t_0} \right)$$

Wir testen, welche Gleichung diese Funktion erfüllt. Davor berechnen wir noch T^* . Es ist

$$T^*(y) = \sup_x (xy - T(x))$$

Hieraus folgt

$$0 = \frac{\partial}{\partial x} (xy - T(x)) = y - T'(x) \implies y = T'(x) \implies x = T'^{-1}(y)$$

Es ist also

$$T^*(y) = yT'^{-1}(y) - T(T'^{-1}(y))$$

oder

$$T^*(T'(x)) = xT'(x) - T(x) \quad (60)$$

Jetzt können die Ableitungen von S berechnet werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} S(x, t) &= S'_0(g(x, t)) \frac{\partial}{\partial t} g(x, t) + T \left(\frac{x - g(x, t)}{t - t_0} \right) - \\ &\quad - T' \left(\frac{x - g(x, t)}{t - t_0} \right) \frac{\partial}{\partial t} g(x, t) - T' \left(\frac{x - g(x, t)}{t - t_0} \right) \frac{x - g(x, t)}{t - t_0} = \\ &= \left(S'_0(g(x, t)) - T' \left(\frac{x - g(x, t)}{t - t_0} \right) \right) \frac{\partial}{\partial t} g(x, t) + \\ &\quad + T \left(\frac{x - g(x, t)}{t - t_0} \right) - T' \left(\frac{x - g(x, t)}{t - t_0} \right) \frac{x - g(x, t)}{t - t_0} = \\ &= -T^* \left[T' \left(\frac{x - g(x, t)}{t - t_0} \right) \right] \end{aligned}$$

Hier wurde (59) und (60) benutzt.

Andererseits ist

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial x} S(x, t) &= S'_0(g(x, t)) \frac{\partial}{\partial x} g(x, t) + (t - t_0) T' \left(\frac{x - g(x, t)}{t - t_0} \right) \frac{1 - \frac{\partial}{\partial x} g(x, t)}{t - t_0} = \\
 &= \left(S'_0(g(x, t)) - T' \left(\frac{x - g(x, t)}{t - t_0} \right) \right) \frac{\partial}{\partial x} g(x, t) + T' \left(\frac{x - g(x, t)}{t - t_0} \right) = \\
 &= T' \left(\frac{x - g(x, t)}{t - t_0} \right)
 \end{aligned}$$

Das ergibt zusammen

$$\frac{\partial}{\partial t} S(x, t) = -T^* \left(\frac{\partial}{\partial x} S(x, t) \right)$$

8.2.4 Bemerkungen

- In diesem Kapitel ist häufig von Welle-Teilchen Dualismus die Rede. Tatsächlich sollten wir eher von Wellenfront-Teilchen Dualismus sprechen. Mit dem Fermatschen Prinzip und seiner Entsprechung, dem Prinzip der kleinsten Wirkung, bewegen wir uns nach wie vor im Rahmen der geometrischen Optik. Typische Charakteristika von Wellen wie Wellenlänge oder Frequenz gibt es hier nicht. Betrachtet man allgemeine Wellenprozesse, so stellt sich die HJE in etwa als Grenzfall sehr kleiner Wellenlängen heraus. In diesem Fall bewegen sich Wellen wie Teilchen.
- Die Berechnung der Wirkung $S(x, t)$ ausgehend von der Lösung liefert stets die spezielle Lösung mit Anfangswert $\chi_{\{x_0\}}(x)$.

Es gibt erstmal keine Herleitung für einen allgemeinen Anfangswert, da es – im Gegensatz zu linearen Gleichungen – hier kein additives Superpositionsprinzip gibt. Es ist a-priori nicht klar, wie verschiedene Anfangswerte gekoppelt werden müßten.

Deshalb wird die Gleichung mit einem allgemeinen Anfangswert postuliert. Später stellt sich heraus, daß das richtige Superpositionsprinzip die inf-Faltung ist.

8.3 Die konjugierte Wirkung

Gleichung (58) bestimmt die Lösung durch eine Faltung. Wie bekannt ist die konvex konjugierte der Faltung die Summe der konvex konjugierten. Das legt die Idee nahe, anstelle von $S(x, t)$ die Legendretransformation

$$S^*(q, t) = \sup_x (\langle x, q \rangle - S(x, t))$$

zu betrachten. Die duale Variable zu $x \in \mathcal{X}$ liegt in \mathcal{X}^* . Die Berechnung des Supremums durch Differentiation ergibt $q = \partial_x S$. Aber das ist der Impuls $p = \partial_x S$. Es gilt somit

$$S^*(p, t) = \langle x, p \rangle - S(x, t)$$

für $p = \partial_x S$ oder, äquivalent $x = \partial_p S^*$.

Differentiation bezüglich t ergibt

$$\partial_t S^*(p, t) = -\partial_t S(x, t)$$

Damit erhalten wir aus der Gleichung für S

$$\partial_t S^*(p, t) = H(x, p) \Big|_{x=\partial_p S^*} = H(\partial_p S^*, p)$$

Das ist die Gleichung für die konjugierte Wirkung.

8.3.1 Die konjugierte Wirkung im potentialfreien Fall

Im potentialfreien Fall hängt H nicht von x ab. Das führt auf die einfache Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} S^*(p, t) = T^*(p)$$

Mit dem Anfangswert $S_0^*(p)$ ergibt das die Lösung

$$S^*(p, t) = S_0^*(p) + tT^*(p)$$

die äquivalent zu (58) ist.

Für den speziellen Anfangswert $S_0(x, 0) = \chi_{\{x_0\}}(x)$ erhalten wir $S_0^*(p) = \langle x_0, p \rangle$ und als Lösung

$$\begin{aligned} S^*(p, t) &= \langle x_0, p \rangle + tT^*(p) = \\ &= \langle x_0 + (t - t_0)v_0, p \rangle = \langle x(t), p \rangle \end{aligned}$$

mit konstantem Impuls $p = p(t) = p_0$.

$S^*(p, t)$ beschreibt also die Entwicklung der "Impulsfront" für einen im Punkt x_0 angreifenden konstanten Impuls.

Bild!

8.3.2 Die Trajektorie aus der Wirkung

Faßt man die erhaltenen Gleichungen zusammen, sieht man, daß man die Trajektorie $(p(t), x(t))$ aus dem System

$$\begin{aligned} p(t) &= \frac{\partial}{\partial x} S(x, t) \\ x(t) &= \frac{\partial}{\partial p} S^*(p, t) \end{aligned}$$

erhält, wobei jeweils die entsprechenden inversen Ausdrücke für die Anfangswerte eingesetzt werden müssen. **Ausführlicher!**

8.4 Die Schrödingergleichung

Die Hamilton-Jacobi-Gleichung beschreibt zwar eine “Wellenfront”, aber keine Welle. Typische Charakteristika von Wellen wie Wellenlänge oder Frequenz gibt es hier nicht. Echte Wellenprozesse kann man mit den Maxwellgleichungen beschreiben. Aus ihnen lassen sich – z.B. für das elektrische Feld $E(x, t)$ – Wellengleichungen herleiten. Im Vakuum hat sie die Form

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} E(x, t) - \Delta E(x, t) = 0$$

Hier ist Δ der Laplaceoperator und c die Lichtgeschwindigkeit. Diese Gleichung hat die typische Form einer Wellengleichung, wie etwa die Gleichung für die schwingende Saite (Faustformel: Krümmung in der Zeit = Krümmung im Raum).

Die Gleichung hat als Lösung

$$E(x, t) = A e^{-i(\omega t - [k, x])}$$

was man als ebene Welle bezeichnen kann. Hier ist $[\cdot, \cdot]$ das 3-D Skalarprodukt. ω (Frequenz) und k (Wellenvektor) sind freie Parameter. Setzte man diesen Ansatz in die Gleichung ein, erhält man den Zusammenhang

$$\|k\| = \frac{\omega}{c},$$

die Dispersionsrelation. Die Wellenlänge λ wird aus

$$\|k\| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

definiert.

Eine typische Eigenschaft von Wellen ist, daß sie sich nicht – wie etwa Dichten oder Wahrscheinlichkeiten – reell addieren sondern komplex. Diese komplexe Superposition wird Interferenz genannt.

8.4.1 Die heuristische Herleitung der Schrödingergleichung

Doppelspaltexperimente mit Elektronen (die als Teilchen angesehen wurden) haben gezeigt, daß auch sie Interferenzerscheinungen z.B. am Doppelspalt hervorrufen. Das legt die Idee nahe, eine Wellengleichung für Teilchen herzuleiten, d.h., die Wellen- und Teilchenattribute zu koppeln.

Wir starten mit der Wellengleichung

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, t) - \Delta \psi(x, t) = 0$$

die, wie erwähnt, die Lösung

$$\psi(x, t) = A e^{-i(\omega t - [k, x])}$$

besitzt. Louis de Broglie kam – gestützt auf die Vorarbeiten von Max Planck – 1924 im Rahmen seiner Dissertation auf die Idee, daß der Welle-Teilchen-Dualismus auf jegliche feste Materie anzuwenden sei, das heißt, daß auch Teilchen ein Wellenvektor und eine Frequenz zuzuordnen sei. Er postulierte folgende Zusammenhänge:

$$\begin{aligned} E &= \hbar \omega \\ p &= \hbar k \end{aligned}$$

Diese Gleichungen waren bereits bekannt, wurden aber von “rechts nach links” gelesen: Einer Welle mit Frequenz ω und Wellenvektor k kann man Attribute eines Teilchens zuordnen, nämlich Energie und Impuls. Der Vorschlag von Louis deBroglie war, daß man diese Gleichungen auch “links nach rechts” lesen kann.

Schrödinger kam auf die Idee, diese Beziehungen zu benutzen um eine Wellengleichung für Teilchen herzuleiten. Er fragte sich, welcher Gleichung so eine Materiewelle genügen würde. Wenn wir die deBroglie-Gleichungen in die Lösung der Wellengleichung einsetzen, erhalten wir

$$\psi(x, t) = A \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (Et - [p, x]) \right)$$

Für diese Funktionen suchen wir (wie Schrödinger) eine Gleichung. Dazu leiten wir diese Funktion partiell nach Zeit und Ort ab und versuchen sie in einen geeigneten Zusammenhang zu bringen. Dazu nehmen wir an, daß das Teilchen die konstante Energie E hat und seine Bewegung vom Hamiltonian

$$H(p, x) = \frac{1}{2m} \|p\|^2 + U(x)$$

bestimmt wird. Es gelte also

$$E - \frac{1}{2m} p^2 - U(x) = 0 \quad (61)$$

Differenziert man $\psi(x, t)$ nach t und x , erhält man

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= -\frac{i}{\hbar} E \psi(x, t) \\ \Delta \psi(x, t) &= -\frac{1}{\hbar^2} p^2 \psi(x, t) \end{aligned}$$

Setzt man diese Ausdrücke in (61) ein, erhält man Damit erhält man

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta - U(x) \right) \psi(x, t) = 0$$

oder

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, t) + U(x) \psi(x, t) \quad (62)$$

die berühmte Schrödingergleichung.

Damit ergibt sich folgendes Postulat (1. Quantisierung): Man nehme den klassischen Hamiltonian $H(p, x)$ des betrachteten Problems und ersetze in der Gleichung $E = H(p, x)$, E , p und x nach folgenden “Ersetzungsregeln”:

$$\begin{aligned} E &\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ p &\rightarrow -i\hbar \nabla \\ x &\rightarrow x \end{aligned}$$

Das ergibt die allgemeiner Gleichung

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \mathbf{H}(i\hbar \nabla, x) \psi(x, t)$$

oder abstrakt geschrieben

$$\frac{\hbar}{i} \dot{\psi} = \mathbf{H}\psi \quad (63)$$

wobei \mathbf{H} ein Operator ist, der auf die Funktion ψ aus einem geeigneten Hilbertraum wirkt. Diese Gleichung hat die abstrakte Lösung

$$\psi(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}t\mathbf{H}\right)\psi_0 = \mathbf{U}(t)\psi_0$$

mit der Operatorfamilie $\mathbf{U}(t)$ und dem Anfangswert ψ_0 .

Im Fall der Gleichung (62) ist der Operator \mathbf{H} symmetrisch und hat (im richtigen Hilbertraum!) folglich reelles Spektrum. Dann ist die Operatorfamilie $\mathbf{U}(t)$ eine unitäre Gruppe. Diese guten Eigenschaften (eine unitäre Gruppe erhält die Norm im Hilbertraum, die Gruppe ist als Ganzes Diagonalisierbar und die Eigenwerte sind rein imaginär) bilden die ersten Postulate der Quantenmechanik:

- Es sei $\mathcal{H} = L_2(\Omega)$ ein für das vorliegende Problem geeigneter Hilbertraum.
- Der Zustand eines Quantenteilchens sein gegeben durch einen Einheitsvektor $\psi \in \mathcal{H}$. $\psi = \psi(x)$, $x \in \Omega$.
- Die reelle Funktion $P(x) = |\psi(x)|^2$ sei die Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens in Ω . Genauer: Ist $B \subset \Omega$ eine Borelmenge, dann sei $\mu(B) = \int_B |\psi(x)|^2 dx$ die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Raumgebiet B aufzufinden. Wegen der Additivität von μ und der Normierungsbedingung $\mu(\Omega) = 1$ (ψ ist Einheitsvektor!) läßt sich μ tatsächlich als Wahrscheinlichkeitsmaß interpretieren.
- Die zeitliche Evolution von ψ wird bestimmt durch eine unitäre Gruppe $\mathbf{U}(t)$, deren Generator \mathbf{H} nach den genannten “Ersetzungsregeln” aus einem klassischen Hamiltonian hervorgeht.
- Eine Beobachtung des Zustandes ist das Skalarprodukt $(\mathbf{A}\psi, \psi)$, wobei \mathbf{A} ein geeigneter selbstadjungierter Operator ist.

8.4.2 Bemerkungen zur Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung in ihrer abstrakten Form (63) zählt als Startpunkt der Physik. Insbesondere ist die klassische Mechanik als Spezialfall $\hbar \rightarrow 0$ der Quantenmechanik untergeordnet. In diesem Zusammenhang sollte man folgende “Unlogigkeiten” der Theorie bemerken:

- Gleichung (63) ist linear. Alle nichtlinearen Effekte in der Physik sollen Folge dieser linearen Gleichung sein.
- Die Familie $\mathbf{U}(t)$ bildet eine unitäre Gruppe. D.h., sie bestimmt für einen gegebenen Zustand ψ_0 die Zukunft (und die Vergangenheit!) für alle Zeiten. Die Welt ist also deterministisch.
- Um Gleichung (63) aufzustellen ist als erstes ein geeigneter *klassischer* Hamiltonian $H(p, x)$ zu finden und zu quantisieren. Dabei sollte die klassische Beschreibung der Quantenbeschreibung eigentlich nachgeordnet sein.

- Die Ersetzungsregeln sind für allgemeine Hamiltonians nicht geeignet, sondern eigentlich nur für Hamiltonians der Form $H(p, x) = T^*(p) + U(x)$, da als klassische Variablen p und x stets kommutieren, als Operatoren aber im allgemeinen nicht. So gilt im klassischen z.B. $H(p, x) = xp = px$, der Quantenhamiltonian $\mathbf{H}\psi = -x i\hbar \nabla \psi \neq -i\hbar \nabla (x\psi)$ ist aber nicht bestimmt.
- $\psi(x) = a(x) + b(x)i$ ist eine komplexe Funktion, die aus a (Realteil) und b Imaginärteil besteht. Gleichung (62) ist also als gekoppeltes System zweier Gleichungen für zwei reelle Funktionen a und b zu verstehen. Da man in der Physik nur reellen Größen einen Sinn als beobachtbare Größen geben kann, könnte man versuchen, a und b einen Sinn zu geben, was aber wohl noch nicht gelungen ist.
- Im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ sollte die Schrödingergleichung in eine klassische Teilchenbeschreibung übergehen. In was für eine, sieht man ihr in der Form (62) aber schlecht an.

8.4.3 Die hydrodynamische Formulierung der Schrödingergleichung

Die eben genannten “Unlogigkeiten” haben schon früh dazu geführt, daß nach Alternativen zur Schrödingergleichung Ausschau gehalten wurde. Ein besonders interessanter Ansatz stammt von Erwin Madelung und wird manchmal hydrodynamische Formulierung genannt. Dieser Ansatz löst einige der genannten Probleme (Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$, reelle Funktionen mit physikalischem Sinn) und wird im weiteren vorgestellt.

Die Schrödingergleichung im einfachsten Fall lautet

$$i\hbar\psi_t = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi$$

Anstelle der Zerlegung von ψ in Real- und Imaginärteil, zerlegen wir ψ in seine Exponential- oder Polardarstellung.

Wir machen also den Ansatz

$$\begin{aligned}\psi &= A \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) \\ P &= A^2 = \psi \cdot \bar{\psi}\end{aligned}$$

Alle Funktionen ψ, A, P, S sind skalare Funktionen von x und t . Nach der üblichen Interpretation ist A die Amplitude und P die Wahrscheinlichkeitsdichte. S hat die physikalische Einheit einer Wirkung.

Wir leiten anstelle der linearen Schrödingergleichung für die komplexe Funktion ψ nichtlineare Gleichungen für die reellen Größen P und S her. Mit dem Index t bezeichnen wir die Zeitableitung.

Wir haben

$$\begin{aligned}\psi_t &= A_t \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) + S_t A \frac{i}{\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) \\ \nabla\psi &= \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) \nabla A + A \frac{i}{\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) \nabla S\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Delta\psi &= \operatorname{div}(\nabla\psi) = \operatorname{div}\left(\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\nabla A\right) + \frac{i}{\hbar}\operatorname{div}\left(A\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\nabla S\right) = \\
&= \left[\nabla A, \nabla\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\right] + \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\Delta A + \\
&+ \frac{i}{\hbar}\left[A\nabla S, \nabla\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\right] + \frac{i}{\hbar}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\operatorname{div}(A\nabla S) = \\
&= \frac{i}{\hbar}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)[\nabla A, \nabla S] + \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\Delta A - \\
&- \frac{1}{\hbar^2}A\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)[\nabla S, \nabla S] + \frac{i}{\hbar}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\operatorname{div}(A\nabla S)
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich aus der Schrödingergleichung

$$\begin{aligned}
i\hbar\psi_t &= i\hbar A_t \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) - S_t A \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) = \\
&= -\frac{i\hbar}{2m}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)[\nabla A, \nabla S] - \frac{\hbar^2}{2m}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\Delta A + \\
&+ \frac{1}{2m}A\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)[\nabla S, \nabla S] - \frac{i\hbar}{2m}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\operatorname{div}(A\nabla S) + UA\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)
\end{aligned}$$

Division durch die Exponentialfunktion ergibt

$$i\hbar A_t - S_t A = -\frac{i\hbar}{2m}[\nabla A, \nabla S] - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta A + \frac{1}{2m}A[\nabla S, \nabla S] - \frac{i\hbar}{2m}\operatorname{div}(A\nabla S) + UA$$

Alle Funktionen sind reell, deshalb ergeben sich zwei Gleichungen für Real- und Imaginärteil (der Gleichung, nicht der Funktion ψ !):

$$\begin{aligned}
\hbar A_t &= -\frac{\hbar}{2m}[\nabla A, \nabla S] - \frac{\hbar}{2m}\operatorname{div}(A\nabla S) \\
-S_t A &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta A + \frac{1}{2m}A[\nabla S, \nabla S] + UA
\end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned}
A_t &= -\frac{1}{2m}[\nabla A, \nabla S] - \frac{1}{2m}\operatorname{div}(A\nabla S) \\
S_t &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta A}{A} - \frac{1}{2m}\|\nabla S\|^2 - U
\end{aligned}$$

Der Ausdruck

$$U_q = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta A}{A} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{P}}{\sqrt{P}} = -\frac{\hbar^2}{4m}\left[\frac{\Delta P}{P} - \frac{\|\nabla P\|^2}{2P^2}\right]$$

wird Quantenpotential genannt.

In der ersten Gleichung schreiben wir P anstelle von A unter Benutzung von

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}A^2 &= P_t = 2AA_t \\
\operatorname{div}(A^2\nabla S) &= \operatorname{div}(P\nabla S) = \operatorname{div}(A \cdot A\nabla S) = A\operatorname{div}(A\nabla S) + A[\nabla A, \nabla S]
\end{aligned}$$

Multiplikation der ersten Gleichung mit $2A$ ergibt schließlich eine Gleichung für P . Das ergibt folgendes System

$$P_t = -\frac{1}{m} \operatorname{div}(P \nabla S) \quad (64)$$

$$0 = S_t + \frac{1}{2m} \|\nabla S\|^2 + U + U_q, \quad U_q = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta \sqrt{P}}{\sqrt{P}} \quad (65)$$

Wir haben anstelle der Gleichung (62) ein äquivalentes (!) Gleichungssystem (64)–(65) hergeleitet, das man jetzt interpretieren kann.

Bemerkungen:

- Gleichung (64) ist eine Kontinuitätsgleichung. So eine Gleichung beschreibt den Transport eines Stoffs mit der Dichte P (manchmal Wahrscheinlichkeitsflüssigkeit genannt) mit der Geschwindigkeit ∇S . Die Strömung der Wahrscheinlichkeitsflüssigkeit ist also eine Potentialströmung, wobei das Potential des Geschwindigkeitsfeldes die Wirkung ist.
- Gleichung (65) ist bis auf U_q die Hamilton-Jacobi-Gleichung aus der klassischen Mechanik.
- Für $\hbar \rightarrow 0$ ist (65) die exakte Hamilton-Jacobi-Gleichung, in der nur die unbekannte Funktion S vorkommt. Die beiden Gleichungen (64) und (65) zerfallen dann. Man kann erst (65) lösen und anschließend (64) als Kontinuitätsgleichung mit gegebenem Geschwindigkeitsfeld ∇S betrachten.
- Das Quantenpotential U_q ist der einzige Term in den Gleichungen, in dem \hbar vorkommt. Man kann die Quantenmechanik als klassische Theorie interpretieren in dem Sinne, daß es neben U noch ein weiteres Potential U_q gibt, das für $\hbar \rightarrow 0$ verschwindet (quasiklassischer Limit).

Einen ähnlichen Zusammenhang findet man zwischen der klassischen Liouvillegleichung, die äquivalent zum Hamiltonsystem ist und der Fokker-Planck-Gleichung, die dasselbe klassische System mit einer zusätzlichen Kraft (Zufallskraft) beschreibt. Im Grenzfall (deterministischer Limit) “Zufall” $\rightarrow 0$ geht die Fokker-Planck-Gleichung in die Liouvillegleichung über.

- Das Gleichungssystem (64)–(65) ist auf den ersten Blick viel schwerer zu lösen als die Schrödingergleichung (62).
- Die Störungsentwicklung der Wirkung bezüglich \hbar wird WKB-Methode genannt.
- Der in der Mathematik sehr wichtige nichttriviale Grenzwert

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \hbar \log \int_A e^{-\frac{\varphi(x)}{\hbar}} dx = - \inf_{x \in A} \varphi(x)$$

wird Laplace-Prinzip oder Method of steepest descent genannt und spielt in der large deviations theory und der abstrakten harmonischen Analysis eine wichtige Rolle.