IV Dynamik: erste Aspekte

Dynamik: zeitabhängige Probleme $\psi(\vec{r},t)$

a) zeitunabhängige Felder:

$$H(\underline{\vec{r}},\underline{\vec{p}}) = T(\vec{p}) + V(\vec{r}) \quad \text{mit} \quad \underline{H}\,\varphi_n = \varepsilon_n \varphi_n$$

$$\rightarrow \psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n\, e^{-i\frac{\varepsilon_n t}{\hbar}}\, \varphi_n(\vec{r})$$

c_n als Konstante durch Anfangsbedingungen bestimmt

in ÜA Formalismus abgearbeitet

wenn $\underline{H}\,\varphi_n = \varepsilon_n \varphi_n$ nicht gelöst werden kann,
so Störungstheorie (später)

b) echte Zeitdynamik, durch zeitabhängige Felder induziert

$$\underline{H}(\underline{\vec{r}},\underline{\vec{p}},t) = T(\vec{p}) + V(\vec{r},t)$$

Kopplg. an elektromagnetische Felder, z.B. optische Frequenzen

Separationsansatz geht i.a. nicht,
aber einige exakt lösbare Probleme
später: auch nicht exakt lösbare Probleme (Störungstheorie)

1. Teilchen unter mechanischen Kräften

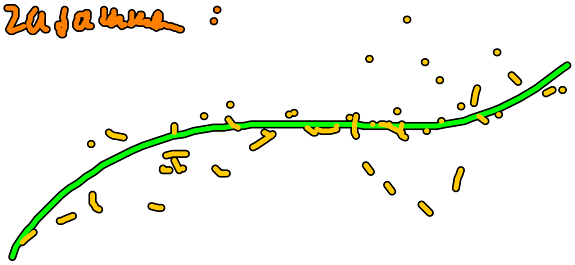
geltende Ehrenfest-Theoreme für Erwartungswerte $\langle \underline{A} \rangle = \int d^3r\, \psi^*(\vec r,t)\, \underline{A}\, \psi(\vec r,t)$

$$\underbrace{\begin{aligned} \langle \dot{\vec r} \rangle &= \frac{1}{m} \langle \vec p \rangle \\ \langle \dot{\vec p} \rangle &= - \langle \vec\nabla_r V(\vec r,t) \rangle \end{aligned}}_{\text{Gleichungen f. Mittelwerte nach Ehrenfest}} \neq - \vec\nabla_r \langle V(\vec r,t) \rangle$$

"$\cdot$" $\hat{=} \frac{d}{dt}$

nicht wie klass. Mechanik

Die klassische Bahn der Mechanik fällt mit den Erwartungswerten der QM für 2 Fälle zusammen:



klass. Bahn $\hat{=}$ EW

a) örtlich konstante Kraft $\vec F(t)$

$$V(\vec r) = - \vec r \cdot \vec F(t) \quad \text{denn} \quad -\vec\nabla_r V = \vec F(t)$$

$$\langle \dot{\vec r} \rangle = \frac{\langle \vec p \rangle}{m}$$

$$\langle \dot{\vec p} \rangle = \int d^3r\, \psi^*(\vec r,t)\, \vec F(t)\, \psi(\vec r,t) = \vec F(t)$$

$$\boxed{\langle \dot{\vec p} \rangle = \vec F(t)}$$

Newtongesetz f. Mittelwert

b) harmonischer Oszillator $\quad V(\vec r) = \frac{m}{2}\omega^2 \vec r^{\,2}$

$$\langle \dot{\vec r}\rangle = \frac{\langle \vec p\rangle}{m} \quad *$$

$$\langle \dot{\vec p}\rangle = \int d^3r\, \psi^*(\vec r,t)\, \left(-\nabla_r\right)\left(\frac{m}{2}\omega^2 \vec r^{\,2}\right)\psi(\vec r,t)$$

$$= -\int d^3r\, \psi^*(\vec r,t)\; m\omega^2\, \vec r\; \psi(\vec r,t)$$

$$\parallel$$

$$\langle \vec r\rangle$$

$$\langle \dot{\vec p}\rangle = -m\omega^2\langle \vec r\rangle$$

in $*$ einsetzen

$$\langle \ddot{\vec r}\rangle = \frac{\langle \dot{\vec p}\rangle}{m} = -\omega^2\langle \vec r\rangle$$

klass. Gl. f. harmon. Oszillator

beachte: gilt nur f. Mittelwerte d. Kurve

c) volle Wellenpaketdynamik kann für (hier 1d) harmonischer Oszillator und externe Kraft $\vec F(t)$ angegeben werden

$$i\hbar\,\partial_t\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \overbrace{x\vec F(t)}^{V(t)}\right)\psi$$

kinet. $\qquad$ potentielle $\qquad$ externe Kraft über V dargestellt

$\Psi(x,t)$ muß gefunden werden:

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\left[x-\langle x\rangle(t)\right]^2 + \frac{i}{\hbar}\langle p\rangle(t)\, x - i\varphi(t)\right)$$

$\langle x \rangle$ und $\langle p_x \rangle$ genügen den klassischen Oszillatorgleichungen

$\varphi(t)$ zu bestimmen Ü A

2. Teilchen im magnetischen Feld

2.1. Erinnerung an klass. Mechanik

$$H = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\varphi$$

$\uparrow$ Ladung

Hamiltonfunktion eines Teilchens im elektromagnetischen Feld und Potentiale $\vec{A}, \varphi$

$$\vec{E} = -\partial_t \vec{A} - \vec{\nabla}\varphi \,, \quad \vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$$

um Magnetfeld einbauen wählen wir Potentiale, wollen Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$, B = konstant

$$\vec{A} = (-By, 0, 0)\,, \quad \varphi = 0$$

1/ $\Rightarrow \vec{E} = 0$

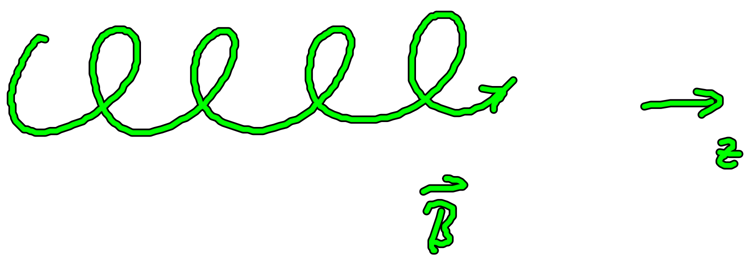
2/ $\Rightarrow \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ -By & 0 & 0 \end{vmatrix} = \vec{e}_z \left(0 + \frac{\partial}{\partial y} By \right) = B\vec{e}_z$

$$\Rightarrow H = \frac{(p_x + qBy)^2}{2m} + \frac{p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

H ein geladen Teilchen im Magnetfeld

$\vec{e}_z B = \text{konst}$

klassisch Gleichungen liefern:



2.2. Quantenmechanik d. Teilchen im Magnetfeld

$$\underline{H} = \frac{(p_x + qBy)^2}{2m} + \frac{p_y^2 + p_z^2}{2m}$$

$\omega = \frac{qB}{m}$ Zyklotronfrequenz

$$(p_x + qBy)(p_x + qBy) = p_x^2 + p_x qBy + qByp_x + q^2B^2y^2.$$

Auf Vertauschung achten!

$$= p_x^2 + 2qBy\,p_x + q^2B^2y^2$$

$$\underline{H} = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + \omega y\, p_x + \frac{1}{2} m\omega^2 y^2$$

man sieht: $[p_x, \underline{H}] = 0$, $[p_z, \underline{H}] = 0$

$\underline{H}$ muß Eigenfunktion d. Imp. ops. haben

p_x, p_z

$$p_x\, \underline{e^{ik_x x}} = \frac{\hbar}{i}\partial_x e^{ik_x x} = \hbar k_x\, \underline{e^{ik_x x}}$$

Ansatz f. EF v. $\underline{H}$

$$\underline{H}\,\Psi = E\,\Psi$$

$$\Psi = \frac{e^{ik_x x}}{\sqrt{L}}\,\frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{L}}\,\varphi(y)$$

Normierung d. der Welle

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\hbar^2 k_x^2 + \hbar^2 k_z^2\right) + \frac{p_y^2}{2m} + \omega y\,\hbar k_x + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2\right]\varphi = E\varphi$$

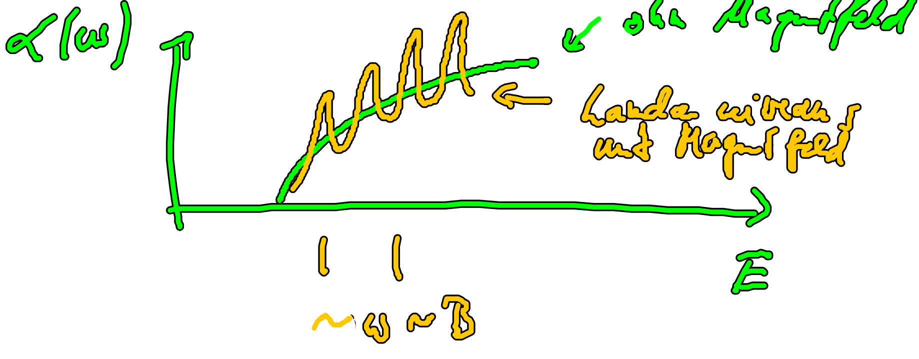
$$\left[\frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (y-y_0)^2\right]\varphi(y) = \underbrace{\left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right)}_{\text{Zahl} \,\hat{=}\, \text{Energie}}\varphi(y)$$

$$y_0 = -\hbar k_x / m\omega$$

kinetische En.   potentielle En. eines harmon. Oszillators in y mit verschobener Ruhelage y_0

$$E = \underbrace{\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}}_{\text{Vorwärtsbewegung als Wellenpaket}} + \underbrace{\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)}_{\text{diskrete Energieniveaus d. harmonischen Oszillators}} = E(k_z, n)$$

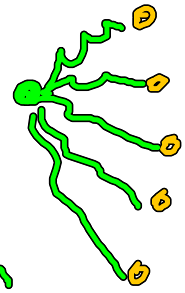
<u>Beispiel</u>: Elektronengas in Festkörper



3. Wechselwirkung eines Oszillators mit seiner Umgebung

Modell eines dynamischen Systems in Umgebung

1 Oszillator ≙ Stelle im Atom



viele andere Oszillatoren ≙ elektromagnet. Feld der Umgebg. d. Atoms

$$\underline{H} = \hbar\omega_0 \left(a_0^+ a_0 + \frac{1}{2}\right) + \sum_i \hbar\omega_i \left(a_i^+ a_i + \frac{1}{2}\right)$$

dynamisch System — viele Oszill. d. Umgebg.

$$+ \sum_i \underbrace{\hbar g}_{\text{Energie}} \left(a_0 a_i^+ + a_0^+ a_i\right)$$

$[g]$ = Frequenz

je ein Quant vernichtet bzw. erzeugt in den verschied. Systemen

__Ziel__: Bewegungsgleichg. f. $\langle x_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \langle a_0^+ + a_0 \rangle$

siehe VL harmon. Oszill.

$$\langle \dot{a}_0^+ \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\underline{H}, a_0^+] \rangle$$

und Ehrenfest

$$= i\omega_0 \langle a_0^\dagger \rangle + i \sum_i g \langle a_i^\dagger \rangle$$

$\bar{u}A$

koppelt an alle Oszillatoren der Umgebung

benötige: $\langle \dot{a}_i^\dagger \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, a_i^\dagger] \rangle$

$$= i\omega_i \langle a_i^\dagger \rangle + i g \langle a_0^\dagger \rangle$$

koppelt auch an dynamisches System

Gleichg. f. $\langle \dot{a}_i^\dagger \rangle$ löse und einsetzen in $\langle \dot{a}_0^\dagger \rangle$.

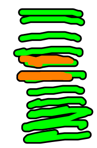
$$\langle \dot{a}_0^\dagger \rangle = i\omega_0 \langle a_0^\dagger \rangle - \sum_i g^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{t} dt' \, e^{i\omega_i (t-t')} \langle a_0^\dagger \rangle (t')}$$

Zeitverzögerung, Dgl. d. Oszillators hängt zu aller Zeit t von allen früheren Zeiten t' ab

„nicht markoffsches“ Verhalten

Gedächtnis

$$\sum_i g^2 e^{i\omega_i(t-t')}$$ genau ansehen

ω_i  sollen dicht liegen

$\Delta\omega_i \approx$ konst $= \Delta\omega$

mit $$\sum_i = \sum_i \frac{\Delta\omega_i}{\Delta\omega_i} = \frac{1}{\Delta\omega}\int d\omega$$

$$\underbrace{\frac{g^2}{\Delta\omega}}_{\tilde g^2} \int_{0\;(-\infty)}^{\infty} d\omega\, e^{i\omega(t-t')} = \tilde g^2\, \zeta(t-t')$$

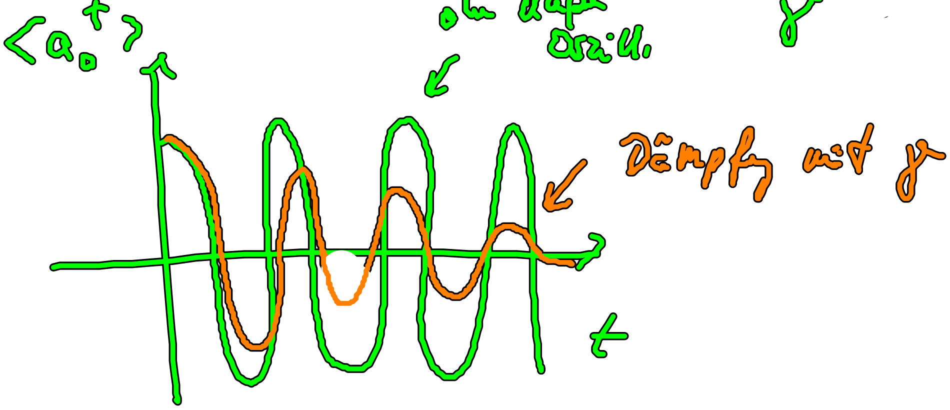
$$\zeta(t-t') = \pi\,\delta(t-t') + i\,P\,\frac{1}{t-t'}$$

Hauptwert

von oben

$$\langle \dot a_0^+ \rangle = i\omega_0 \langle a_0^+ \rangle - \int_{-\infty}^{t} dt'\, \tilde g^2 \pi\, \delta(t-t') \langle a_0^+ \rangle(t')$$

$$= i\omega_0 \langle a_0^+ \rangle - \underbrace{\tilde g^2 \pi}_{\gamma} \langle a_0^+ \rangle(t)$$



Verlust d. Anregungsenergie an die Umgebung.

genau: nur der Grundzustand des Quantensystems ist stabil gegen Umgebung (ÜA)