IV Dynamik: erste Aspekte

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

a) zeitunabhängige Felder:

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

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

c_n als Konstanten durch Anfangsbedingungen bestimmt

in ÜA. Formalismus abgearbeitet

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

b) echte Zeitdynamik, durch zeitabhängige Felder induziert

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

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

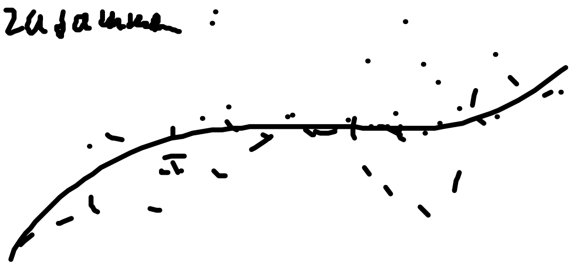
verwende Ehrenfest Theorem für Erwartungswerte $\langle \underline{A} \rangle = \int d^3r\, \psi^*(\vec r,t)\, \underline{A}\, \psi(\vec r,t)$

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

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

nicht wie klass. Mechanik

Die klassische Bahn kann 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 $V(\vec{r}) = \frac{m}{2}\omega^2 \vec{r}^{\,2}$

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

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

$$= -\int d^3r\, \underbrace{\psi^*(\vec{r},t)\, m\omega^2\, \vec{r}\, \psi(\vec{r},t)}_{\langle \vec{r} \rangle}$$

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

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

beachten: gilt nur f. Mittelwerte d. Kurve

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

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

kinet. potentielle externe Kraft über V dargestellt

$\Psi(x,t)$ muß gefunden werden:

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

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

$\varphi(t)$ zu bestimmen $\quad$ ÜA

2. Teilchen im magnetischen Feld

2.1. Erinnerung an klass. Mechanik

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

Ladung

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

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

um Magnetfeld einbauen wählen wir Potentiale,

wollen Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$, $B =$ konstant

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

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

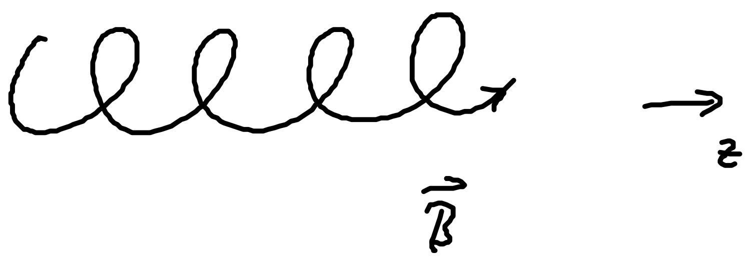
2/ $\Rightarrow \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ -By & 0 & 0 \end{vmatrix} = \vec{e}_z \left(0 + \frac{\partial}{\partial y} By \right) = B\vec{e}_z$

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

H ein geladen Teilchen in Magnetfeld

$\vec{e}_z B$ = konst

klassisch fliegt zu liefern:



2.2. Quantentheorie d. Teilchen in Magnetfeld

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

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

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

auf Vertauschg. 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. Impulsoperatoren 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. ebenen Welle

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

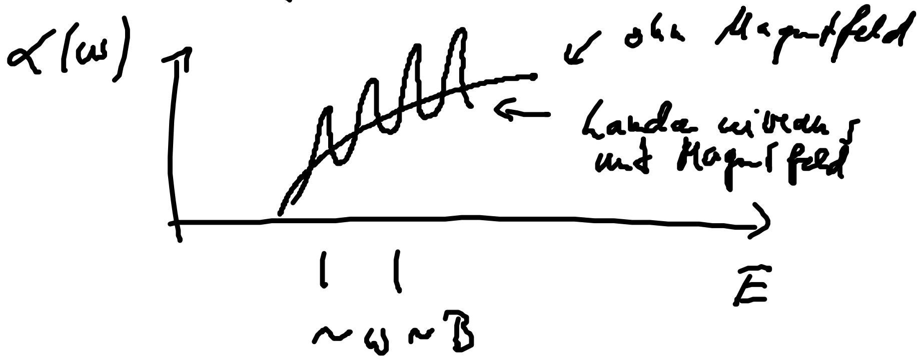
$$\Big[\frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 (y-y_0)^2\Big]\varphi(y) = \underbrace{\Big(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\Big)}_{\text{Zahl} \,\hat{=}\, \text{Energie}}\varphi(y)$$

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

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

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

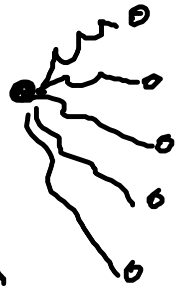
<u>Beispiel</u>: Elektronengas in Festkörper



3. Wechselwirkung eines Oszillators mit seiner Umgebung

Modell eines dynamischen Systems in Umgebung

1 Oszillator
≙ Strahler
im Atom



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

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

dynamisches 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

<u>Ziel</u>: 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

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

ÜA

koppelt an alle Oszillatoren der Umgebung

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

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

koppelt auch an dynamisches System

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

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

Zeitretardierung, Dgl. d. Oszillators hängt zu allen Zeiten t von allen früheren Zeiten t' ab

„nichtmarkoffsches" Verhalten

Gedächtnis

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

ω_i
$\Delta\omega_i$
" kont $= \Delta\omega$

soll dicht liegen

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

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

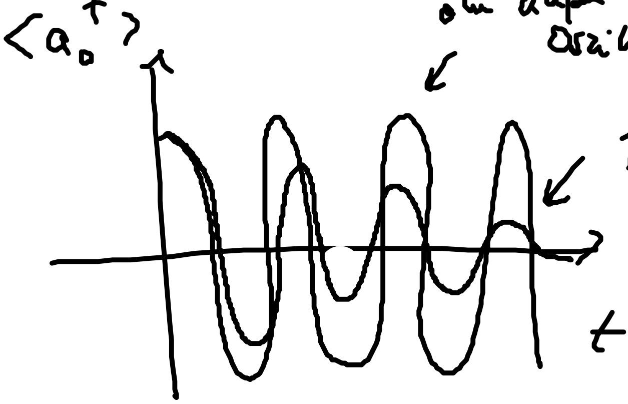
$$\zeta(t-t') = \underline{\pi\,\delta(t-t')} + i P \frac{1}{t-t'}$$

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)