Harmonischer Oszillator

*) $E_n = \hbar\omega_0(n+\frac{1}{2})$, $\omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m}}$ Eigenfrequenz , $n \in \mathbb{N}^0$

*) $u(q) \sim H_n(y)\, e^{-\frac{1}{2}y^2}$, $H_n(y)$ Hermite-Polynom , $y = \left(\frac{mC}{\hbar^2}\right)^{1/4} x$

Eigenwerte, Eigenfunktionen

*) $\psi_{\vec{p}}(\vec{x},t) = A(t)\, e^{i\frac{\vec{p}}{\hbar}\vec{x}}$ ist Eigenfunktion von $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{D}$ (im Ortsraum)

*) $\psi_{\vec{x}_0}(\vec{x},t) = B(t)\,\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}_0)$ ist Eigenfunktion von $\vec{x} = -i\hbar\vec{D}$ (im Ortsraum)

$$\tilde{\psi}_{\vec{x}_0}(\vec{k},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3x\; \psi_{\vec{x}_0}(\vec{x},t)\, e^{-i\vec{k}\vec{x}}$$

$$\underset{(4.4)}{=} \frac{B(t)}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3x\; \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}_0)\, e^{-i\vec{k}\vec{x}}$$

$$= \frac{B(t)}{(2\pi)^{3/2}}\, e^{-i\vec{k}\vec{x}_0}$$

Ähnelt (4.2). Beachte: $\tilde{\psi}_{\vec{x}}$ ist Funktion von $\vec{k}$,
$\psi_{\vec{p}}$ ist Funktion von $\vec{x}$!

Fourier-Trafo von (4.2)

$$\tilde{\psi}_{\vec{p}}(\vec{k},t) \underset{(4.2)}{=} \frac{A(t)}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3x\; e^{-i\vec{k}\vec{x}}\, e^{i\frac{\vec{p}}{\hbar}\vec{x}} = \frac{A(t)}{(2\pi)^{3/2}}\underbrace{\int d^3x\; e^{i\vec{x}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}-\vec{k}\right)}}_{(2\pi)^3\,\delta^{(3)}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}-\vec{k}\right)}$$

$$= (2\pi)^{3/2} A(t)\,\delta^{(3)}\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}-\vec{k}\right)$$ ist δ-Funktion (c.f. 4.4)

Wiederum aus ebener Welle: Energie-Operator $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ (4.5)

$\psi_{EV}(\vec{x},t)$ ist Eigenfunktion von $\hat{E}$ mit Eigenwert $E_0 = \hbar\omega_0$

Fourier Trafo Zeit $t \rightarrow$ Frequenz ω: Eigenfunktion von $\hat{E} \sim \delta(\frac{E}{\hbar} - \omega_0)$

4.b Erwartungswerte

Hatten gesehen: $|\psi(\vec{x},t)|^2$ ist Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum. Muss viele identische Systeme präparieren: Messungen des Ortes bei Zeit t sind verteilt wie $|\psi(\vec{x},t)|^2$. In der Regel: Kann nicht an einem System viele Male messen, da Messung $\psi(\vec{x},t)$ verändern kann.

Impliziert Normierung $\int d^3x \, |\psi(\vec{x},t)|^2 = 1 \quad \forall t$ (4.6)

Der Erwartungswert (= Mittelwert ≠ Median) einer Koordinate x_i ist:

$$\langle x_i \rangle (t) = \int d^3x \; x_i \, |\psi(\vec{x},t)|^2 = \int d^3x \; \psi^*(\vec{x},t) \, x_i \, \psi(\vec{x},t) \qquad (4.7)$$

$(i = 1,2,3)$

Brauchen wieder viele identische Systeme. Im Grenzfall ∞ vielen Messungen:

Erwartungswert = Mittelwert der Messwerte

Um Erwartungswert der Impulse zu berechnen:
Gehen in Impulsraum!

$$\psi(\vec{x},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \; \tilde{\psi}(\vec{k},t)\, e^{i\vec{k}\vec{x}} \qquad (4.8)$$

(inverse Fourier-Trafo)

$$\Leftrightarrow \tilde{\psi}(\vec{k},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3x \; \psi(\vec{x},t)\, e^{-i\vec{k}\vec{x}} \qquad (4.9)$$

Normierung von $\tilde{\psi}(\vec{k},t)$:

$$\int |\tilde{\psi}(\vec{k},t)|^2 d^3k \underset{(4.9)}{=} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \underbrace{\int d^3x \; \psi(\vec{x},t) e^{-i\vec{k}\vec{x}}}_{\sim \tilde{\psi}(\vec{k},t)} \underbrace{\int d^3x' \psi^*(\vec{x}',t) e^{i\vec{k}\vec{x}'}}_{\sim \tilde{\psi}^*(\vec{k},t)}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x \int d^3x' \; \psi(\vec{x},t)\, \psi^*(\vec{x}',t) \underbrace{\int d^3k\, e^{i\vec{k}(\vec{x}'-\vec{x})}}_{(2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{x}'-\vec{x})}$$

$$= \int d^3x \; |\psi(\vec{x},t)|^2 \underset{(4.6)}{=} 1 \qquad (4.10)$$

$\Rightarrow$ $|\tilde{\psi}(\vec{k},t)|^2$ ist Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum!

$\Rightarrow$ Erwartungswert einer Impulskomponente $(\vec{p} = \hbar \vec{k})$:

$$\langle p_j \rangle = \int d^3k \; \tilde{\psi}^*(\vec{k},t)\, \hbar k_j \, \tilde{\psi}(\vec{k},t) \qquad (4.11)$$

Aus (4.8), (4.1): $\hat{p}_j \psi(\vec{x},t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(\vec{x},t)$

$$= \frac{-i\hbar}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \; \tilde{\psi}(\vec{k},t) \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} e^{i\vec{k}\vec{x}}}_{ik_j e^{i\vec{k}\vec{x}}}$$

$$\Rightarrow \quad p_j\, \psi(\vec{x},t) = \frac{\hbar}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k\, \tilde{\psi}(\vec{k},t)\, k_j e^{i\vec{k}\vec{x}}$$

$$\Rightarrow \int d^3x\, \psi^*(\vec{x},t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_j}\right)\psi(\vec{x},t)$$

$$\overset{(4.8)}{=} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x \underbrace{\int d^3k'\, \tilde{\psi}^*(\vec{k},t) e^{-i\vec{k}'\vec{x}}}_{\sim \psi^*(\vec{x},t)} \int d^3k\, \tilde{\psi}(\vec{k},t)\, \hbar k_j e^{i\vec{k}\vec{x}}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \int d^3k'\, \tilde{\psi}^*(\vec{k}',t)\, \tilde{\psi}(\vec{k},t) \underbrace{\int d^3x\, e^{-i\vec{x}(\vec{k}-\vec{k}')}}_{(2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}')}$$

$$= \int d^3k\, |\tilde{\psi}(\vec{k},t)|^2\, \hbar k_j = \langle p_j \rangle$$

$\Rightarrow$ Anwendung des Impuls-Operators (4.1) erlaubt Berechnung von $\langle p_j \rangle$ im Ortsraum

$$\langle p_j \rangle(t) = \int d^3x\, \psi^*(\vec{x},t)\, \hat{p}_j\, \psi(\vec{x},t) \qquad (4.12)$$

Verallgemeinerung auf Potenzen: $\langle x_j^n \rangle$, $\langle p_j^n \rangle$ offensichtlich ($\langle x_j^n \rangle \neq \langle x_j \rangle^n$) Analog für beliebige Operatoren $\hat{O}$:

$$\boxed{\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle(t) &= \int d^3x\, \psi^*(\vec{x},t)\, \hat{O}\, \psi(\vec{x},t) && (4.13a) \\ &= \int d^3k\, \tilde{\psi}^*(\vec{k},t)\, \hat{O}\, \tilde{\psi}(\vec{k},t) && (4.13b) \end{aligned}}$$

Operator im Impulsraum

5. Klassische Mechanik

Motivation: QM hat große formale Ähnlichkeit mit klassischer Mechanik im Hamilton-Formalismus:

5.a Lagrange-Formalismus

Klassische Bewegungsgleichung aus Hamilton'schen Prinzip:
Wirkung S ist stationär:

$$\delta S = 0 \qquad (5.1)$$

$$\text{mit } S(t_1, t_2) = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t)\,dt \qquad (5.2)$$

L: Lagrange-Funktion
q_i: Verallgemeinerte Koordinaten, $\dot{q}_i := \frac{dq_i}{dt}$

Variation in (5.1) für feste $t_1, t_2, q_i(t_1), q_i(t_2)$

(5.2) in (5.1) => $\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta \dot{q}_i\right] dt$

$$\underset{\text{part. Int.}}{\Rightarrow} \delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q_i}\delta q_i - \left(\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right)\delta q_i\right] dt + \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\delta q_i\Big|_{t_1}^{t_2}}_{=0}$$

$$\overset{!}{=} 0 \quad \forall\ \delta q_i(t)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0 \qquad (5.3)$$

Euler-Lagrange Gleichungen. Äquivalent Newton-Gleichungen

Für konservative Kräfte: $L = E_{kin} - V$ (5.4)

$$E_{kin} = \sum_i \frac{1}{2} m_i (\dot{\vec{x}}_i)^2 \qquad (5.5)$$

(in kartesischen Koordinaten)

5.b Hamilton-Gleichungen

Zu q_i kanonisch konjugierte Impuls $p_i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ (5.6)

z.B. cartesische Koordinaten, konservative Kräfte: (5.5), (5.6)

$\vec{p}_i = m_i \dot{\vec{x}}_i$: linearer Impuls

Hamilton-Funktion: Legendre-Trafo der Lagrange-Fkt:

$$H(q_i, p_i, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t) \qquad (5.7)$$

In H: q_i, p_i sind unabhängige Größen

Totales Differenzial:

$$dH = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i \right) + \frac{\partial H}{\partial t} dt$$

$$\underset{(5.7)}{=} \sum_i \left(p_i d\dot{q}_i + \dot{q}_i dp_i - \underbrace{\frac{\partial L}{\partial q_i}}_{\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial q_i} = \dot{p}_i} dq_i - \underbrace{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}}_{p_i\ (5.6)} d\dot{q}_i \right) - \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

Koeffizientenvergleich:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \qquad (5.8a)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial \dot{q}_i} \qquad (5.8b)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t} \qquad (5.8c)$$

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial H}{\partial t}$$

$$\underset{(5.8a,b)}{=} \sum_i \left(-\dot{p}_i \dot{q}_i + \dot{q}_i \dot{p}_i \right) + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} \qquad (5.9)$$

=> H ist erhalten (Konstante der Bewegungsgleichung, wenn sie <u>nicht</u> explizit von t abhängt)

Konservative Kräfte:

$$L = \sum_i \frac{1}{2} m_i (\dot{\vec{x}}_i)^2 - V(\vec{x}_i) \quad \Rightarrow \quad \vec{p}_i = m_i \dot{\vec{x}}_i$$

$$\Rightarrow H = \sum_i \vec{p}_i \dot{\vec{x}}_i - L = \sum_i \left(\frac{\vec{p}_i^{\,2}}{m_i} - \frac{m}{2} \left(\frac{\vec{p}_i}{m_i} \right)^2 \right) + V(\vec{x}_i)$$

$$\Rightarrow H = \sum_i \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} + V(\vec{x}) = E_{tot} \qquad (5.11)$$

5.c Die Poisson-Klammer

Wirkt auf 2 Funktionen F, G von q_i, p_i (Funktionen definiert über Phasenraum)

$$\{F, G\} := \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right) \qquad (5.12)$$

$$\Rightarrow \{F, G\} = -\{G, F\} \quad \Rightarrow \quad \{F, F\} = 0 \quad \forall F \qquad (5.13)$$

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right)$$

$$\underset{(5.8a,b)}{=} \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\} \qquad H\text{: Hamilton-Funktion} \qquad (5.14)$$

z. B. $F = H$ (5.13), (5.14) $\Rightarrow \frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}$ (5.9) ✓✓

$F = q_i$: $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$ (5.8a) ✓✓

$F = p_i$: $\dot{p}_i = \{p_i, H\} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$ (5.8b) ✓✓

F ist Bewegungskonstante falls $\frac{\partial F}{\partial t} = -\{F, H\}$
insbesondere $\frac{\partial F}{\partial t} = \{F, H\} = 0$

<u>Weitere Eigenschaften</u>

$\{F, C\} = 0$, wenn $C \in \mathbb{R}$ = konst. (5.15a)

$\{E + F, G\} = \{E, G\} + \{F, G\}$ $\forall$ Fktn E, F, G (5.15b)

$\{E, FG\} = \{E, F\}G + F\{E, G\}$ (5.15c)

Herleitung:

$$\{E, FG\} = \sum_i \left[\frac{\partial E}{\partial q_i} \left(F \frac{\partial G}{\partial p_i} + G \frac{\partial F}{\partial p_i} \right) - \frac{\partial E}{\partial p_i} \left(F \frac{\partial G}{\partial q_i} + G \frac{\partial F}{\partial q_i} \right) \right]$$

$$= \sum_i \left[G \left(\frac{\partial E}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial p_i} - \frac{\partial E}{\partial p_i} \frac{\partial F}{\partial q_i} \right) + F \left(\frac{\partial E}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial E}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right) \right]$$

$$= \{E, F\}G + F\{E, G\}$$