

Generalisierte Koordinaten

Generalisierte Geschwindigkeiten

Generalisierte Kräfte

Lagrange-Funktion

Lagrange-Gleichungen

Virtuelle Verrückung

Virtuelle Bahnkurve

Wirkungsfunktion

\dot{q}_k , erste Ableitung der generalisierten Koordinaten q_k nach der Zeit:

$$\dot{q}_k(t), k = 1, \dots, f$$

q_k , dem gegebenen mechanischen System optimal angepasste Koordinaten. Ihre Anzahl entspricht den Freiheitsgraden des Systems.

$$q_k(t), k = 1, \dots, f$$

Differenz der kinetischen Energie $E_{\text{kin}} = T$ und der potenziellen Energie $E_{\text{pot}} = V$ als Funktionen der generalisierten Koordinaten q_k und generalisierten Geschwindigkeiten \dot{q}_k :

$$L(q_k, \dot{q}_k, t) = T(q_k, \dot{q}_k) - V(q_k, t)$$

Q_k , definiert durch die Ausdrücke

$$Q_k = \sum_{i=1}^{3N} F_i \frac{\partial x_i}{\partial q_k}, k = 1, \dots, f$$

$x_i, i = 1, \dots, 3N$ sind die kartesischen Koordinaten eines Systems aus N Massenpunkten.

Momentane infinitesimale Verschiebung $\delta \vec{r}$ eines Massenpunktes unter Einhaltung der für die Bewegung geltenden einschränkenden Nebenbedingungen, ohne Änderung der Zeitvariablen:

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \delta \vec{r} \text{ bei } \delta t = 0$$

System von f Differentialgleichungen 2. Ordnung in der Zeit zur Bestimmung der generalisierten Koordinaten q_k als Funktionen der Zeit:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0, k = 1, \dots, f$$

Wirkungsintegral, W Integral der Lagrange-Funktion $L(q_k, \dot{q}_k, t)$ über die Zeit,

$$W = \int_{t_1}^{t_2} L(q_k(t), \dot{q}_k(t), t) dt$$

Zwischen zwei festen Punkten $q_k(t_1), q_k(t_2)$ verlaufende Bahnkurve $\hat{q}_k(t)$, die von der tatsächlichen Bahnkurve $q_k(t)$ infinitesimal abweicht durch Zusammenfassung der virtuellen Verrückungen δq_k zu einer festen Zeit t mit $\delta t = 0$.

Prinzip der kleinsten Wirkung

Hamiltonsche Formulierung

Generalisierter Impuls

Kanonisch konjugiert

Hamilton-Funktion

Legendre-Transformation

Hamilton-Gleichungen

Zyklische Koordinate

Anstelle der generalisierten Geschwindigkeiten werden die generalisierten Impulse benutzt.

Hamiltonsches Prinzip, die von einem mechanischen System im Zeitablauf beschriebene Bahnkurve ist vor allen anderen virtuellen Bahnkurven dadurch ausgezeichnet, dass das Wirkungsintegral einen Extremwert (meist ein Minimum) annimmt.

Die generalisierten Koordinaten q_k und die zugehörigen generalisierten Impulse p_k werden als kanonisch konjugiert bezeichnet:

- Drehwinkel und Drehimpuls
- Ort und Impuls
- Energie und Zeit

p_k , definiert als Ableitung der Lagrange-Funktion $L = T - V$ nach der generalisierten Geschwindigkeit \dot{q}_k :

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}, k = 1, \dots, f$$

Überführung einer Funktion $f(x, y)$ in $h(x, p)$ mit $p = \partial f / \partial y$ durch $h(x, p) = f(x, y) - yp$. Der Übergang von der Lagrange-Funktion $L(q_k, \dot{q}_k)$ zur Hamilton-Funktion $H(p_k, q_k)$ ist eine Legendre-Transformation.

H , ergibt sich, wenn man die generalisierten Geschwindigkeiten \dot{q}_k zugunsten der kanonisch konjugierten Impulse p_k aus der theoretischen Beschreibung eliminiert:

$$H(q_k, p_k, t) = \sum_{k=1}^f \dot{q}_k p_k - L(q_k, \dot{q}_k, t)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \Rightarrow H = E = \text{const.}$$

Generalisierte Koordinate, von der die Lagrange-Funktion nicht abhängt. Der zu einer solchen Koordinate kanonisch konjugierte Impuls ist eine Erhaltungsgröße.

$$\frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = \frac{d}{dt} p_{\varphi} = 0$$

Zeitableitungen der generalisierten Koordinaten und Impulse:

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}, k = 1, \dots, f$$

Gleichbedeutend mit den Lagrange-Gleichungen.

Parität

Simultane Eigenfunktion

Eigenwert

Entwicklung der Wellenfunktion

Messung einer Observablen

Entwicklungskoeffizient

Erwartungswert

Matrixdarstellung

Eine Funktion ψ ist gleichzeitig Eigenfunktion zu einem Satz von Operatoren $\hat{O}_1, \dots, \hat{O}_k$ mit Eigenwerten $a_n, n = 1, \dots, k$. Zu den Operatoren \hat{l}^2, \hat{l}_z sind die Kugelflächenfunktionen simultane Eigenfunktionen.

π , einer Wellenfunktion, charakterisiert Verhalten der Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ bei Spiegelung am Koordinatenursprung $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$,

$\psi(-\vec{r}) = +\psi(\vec{r}), \pi = +1$, gerade Parität

$\psi(-\vec{r}) = -\psi(\vec{r}), \pi = -1$, unger. Parität

Eine beliebige Wellenfunktion ψ kann nach dem vollständigen Satz der normierten Eigenfunktionen ψ_n des Operators \hat{O} entwickelt werden:

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n$$

Die Eigenwerte eines Operators \hat{O} sind die möglichen Messwerte der Observablen O . Liefert eine Messung von O das Ergebnis a_n , befindet sich das System im Eigenzustand ψ_n .

Der Entwicklungskoeffizient liefert die Wahrscheinlichkeit $|c_n|^2$, bei einer Messung der Observablen O an einem System im Zustand ψ den Messwert a_n zu finden.

Messungen der Observablen O an einem System im Eigenzustand ψ_n liefern immer den gleichen Messwert a_n ; in einem beliebigen Zustand ψ , der keine Eigenfunktion von \hat{O} ist, schwanken die Ergebnisse um den Erwartungswert.

Des Operators \hat{O} in der durch die Funktionen $\varphi_i, i = 1, \dots, N$ gegebenen Basis:

$$O_{ik} = \int \varphi_i^* \hat{O} \varphi_k dV, \quad i, k = 1, \dots, N$$

Observable werden durch hermitesche Matrizen dargestellt, die in der Basis der Eigenfunktionen diagonal werden.

\bar{O} , der Observablen O im Zustand ψ , Mittelwert der Messwerte der Observablen O an einem System im Zustand ψ :

$$\bar{O} = \int \psi^* \hat{O} \psi dV = \sum_n |c_n|^2 a_n$$

Kommutator

Vertauschbare Operatoren

Vertauschungsrelationen für
Orts- und Impulsoperatoren

Vertauschungsrelationen für
Bahndrehimpulsoperatoren

Hamilton-Operator

Zeitentwicklungsoperator

Schrödinger-Bild

Heisenberg-Bild

Zwei Operatoren heißen vertauschbar, wenn der Kommutator verschwindet, also ihre Anwendungsreihenfolge egal ist. Kommutierende Operatoren besitzen ein simultanes Eigenfunktionssystem:

$$\hat{O}_1 \psi_{nm} = a_n \psi_{nm}, \quad \hat{O}_2 \psi_{nm} = b_m \psi_{nm}$$

\hat{C} , der Operatoren \hat{O}_1 und \hat{O}_2 , Operator, definiert durch:

$$\hat{C} = [\hat{O}_1, \hat{O}_2] = \hat{O}_1 \hat{O}_2 - \hat{O}_2 \hat{O}_1$$

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = j\hbar \hat{l}_z, \quad [\hat{l}^2, \hat{l}_x] = 0$$

$$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = j\hbar \hat{l}_x, \quad [\hat{l}^2, \hat{l}_y] = 0$$

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = j\hbar \hat{l}_y, \quad [\hat{l}^2, \hat{l}_z] = 0$$

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_k] = \hat{x}_i \cdot \hat{p}_k - \hat{p}_k \cdot \hat{x}_i = j \cdot \hbar \cdot \delta_{ik}$$

$\hat{U}(t, t_0)$, beschreibt die zeitliche Entwicklung eines Zustandes ψ vom Zeitpunkt t_0 zum Zeitpunkt t :

$$\psi(t) = \hat{U}(t, t_0) \psi(t_0)$$

$$\hat{U}(t_0, t_0) = 1$$

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{j}{\hbar} H(t-t_0)}$$

\hat{H} , Operator der Gesamtenergie eines quantenmechanischen Systems. Er bestimmt die Zeitentwicklung der Zustandsfunktion ψ . Teilchen der Masse m im Potenzial V :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$$

Formulierung der Quantenmechanik mit zeitabhängigen Operatoren und zeitunabhängigen Zuständen:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = 0$$

$$\frac{d\hat{O}(t)}{dt} = \frac{j}{\hbar} [H, \hat{O}(t)] \text{ Heisenberggleichung}$$

Formulierung der Quantenmechanik mit zeitunabhängigen Operatoren und zeitabhängigen Zuständen:

$$\frac{\partial \hat{O}}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = -\frac{j}{\hbar} H \psi(t) \text{ Schrödingergleichung}$$