

Spezielle Probleme der Theoretischen Physik

1

Mischung aus Vorlesung und Seminarvorträgen

Übersbegriff: Quantendynamik (QD)

genauer: QD stark getriebener Systeme
(d.h. nicht-perturbativ)

In der Vorlesung: nicht-perturbative QD in der
intensiven Laser-Materie-WW

In den Vorträgen: Schwerpunkt auf methodische
Aspekte, die auch in anderen
Forschungsgebieten relevant sind:

1. Korrespondenz zwischen klassischer und Quantendynamik
2. Magnus-Näherung und Wei-Norman-Faktorisierung
3. Adiabatische Näherung, Landau-Zener, geometrische Phase
4. Floquet-Theorie
5. Pfadintegral- und semi-klassische Methoden I & II
6. Numerische Methoden zum Lösen der zeitabhängigen Schrödingers-Gleichung I & II
7. Exakt lösbar zeitabh. Probleme, Separabilität und Lie-Gruppen
8. Zeitabhängige Vielteilchenprobleme

Vorträge 30 min + 15 min Diskussion,
& Vorträge pro Termin

Termine

- 1 7.4.
- 2 14.4.
- 3 21.4.
- 4 28.4.
- 5 5.5. Vorträge 1 u. 2
- 6 12.5.
- 7 19.5.
- 8 (26.5) Vortr. zitaten. Dichtefunktionaltheorie
- 9 2.6. Vorträge 3 u. 4
- 10 9.6. Vorträge 5 u. 6
- 11 16.6.
- 12 [23.6.] umlegen
- 13 30.6. Vorträge 7 u. 8
- 14 7.7. Vorträge 9 u. 10.
- 15 [14.7.] umlegen

Literatur: "Introduction to QM - a time-dependent perspective" David J. Tannor

+ spezifisches, zusätzliches Material
(inkl. Originalarbeiten)

I. Grundlagen der Beschreibung von Materie im äußeren Feld

Zunächst nur ein (aktives) Teilchen der Ladung q und Masse m , nicht-relativistisch, keine Ankopplung an Spin

$$\text{Ham. } H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r}, t))^2 + q\phi(\vec{r}, t)$$

\uparrow
 Vektorpotential
 (z.B. Laserfeld,
 quasi-st. Magnetfelder)

\nwarrow
 skalares
 Potential
 (z.B. Bind-
 pot., quasi-st.
 el. Felder)

Zeitabh. Schrödingers-Gleichung (ZSG)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle$$

Zichtransformation: wähle Funktion $\chi(\vec{r}, t)$ und transformiere

$$\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\chi, \quad \phi' = \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t}$$

$$|\Psi'\rangle = e^{iq\chi/\hbar} |\Psi\rangle$$

Diese Trafo läßt Felder

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

invariant und überführt ZSG in $i\hbar \partial_t |\Psi'\rangle = H' |\Psi'\rangle$.

Wir können z.B. das Bindungspotential abspalten,
 $q\phi(\vec{r}, t) = V(\vec{r}) + q\varphi(\vec{r}, t)$.

Im Fall einer ebenen, el. magn. Welle können wir die Strahlungseichung wählen

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0, \quad \varphi = 0$$

\vec{A} muss Maxwell-Gl. erfüllen \rightarrow Wellenge 4

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \vec{A} = 0$$

Lösung $\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}, \mu} \vec{\epsilon}_{\vec{k}, \mu} \left[q_{\vec{k}, \mu}(t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + q_{\vec{k}, \mu}^*(t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \right]$

Wellenvekt., zwei Mögl. Polarisationen

$\frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\omega_k t}$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \rightarrow \vec{k} \cdot \vec{\epsilon}_{\vec{k}, \mu} = 0$$

zwei Mögl. Polarisationen

$$\omega_k = ck$$

Falls Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi}{k} \gg |\vec{r}|$ in der räumlich relevanten Region, kann die Dipolnäherung gemacht werden,

$$e^{\pm i\vec{k} \cdot \vec{r}} \approx 1 \pm i\vec{k} \cdot \vec{r} + \dots$$

Beispiel: $\lambda = 800 \text{ nm} \gg 1 \text{ \AA}$
 Laserwellenlänge Größe von Atomen, Molekülen

In Dipolnäherung $\vec{A}(\vec{r}, t) \rightarrow \vec{A}(t) \Rightarrow \vec{B} \equiv 0$
 und $[\vec{p}, \vec{A}] = 0 \Rightarrow$

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = \left(\frac{1}{2m} p^2 + V(\vec{r}) - \frac{q}{m} \vec{p} \cdot \vec{A}(t) + \frac{q^2}{2m} A^2(t) \right) |\psi(t)\rangle$$

Führe Eichtrafo mit $\chi = -\vec{A}(t) \cdot \vec{r}$ durch:

$$\vec{A}' = 0, \quad \phi' = \phi + \vec{r} \cdot \partial_t \vec{A} = \phi - \vec{r} \cdot \vec{E}_{\text{class}}$$

da $\vec{E}_{\text{class}} = -\partial_t \vec{A}$

$$|\psi'\rangle = e^{-iq\vec{A}(t) \cdot \vec{r}/\hbar} |\psi\rangle$$

Translation im Impulsraum um \vec{A}
 (Übergang vom kanonischen zum kinetischen Impuls).

$$\rightarrow i\hbar \partial_t |\psi'\rangle = \left(\frac{1}{2m} p^2 + V(\vec{r}) - q\vec{r} \cdot \vec{E}(t) \right) |\psi'\rangle$$

5

In Dipolnäherung ist in beiden Eichungen der Hamiltonian von der Gestalt

$$H = H_0 + W, \quad H_0 = \frac{1}{2m} p^2 + V(\vec{r})$$

$$\text{mit } W = \begin{cases} -\frac{q}{m} \vec{p} \cdot \vec{A}(t) + \frac{q^2}{2m} A^2(t) & \text{Geschw. eichung (GE)} \\ -q\vec{r} \cdot \vec{E}(t) & \text{Längeneichung (LE)} \end{cases}$$

In GE ist $m\vec{v} = \vec{p} - q\vec{A}$, in LE $m\vec{v} = \vec{p}$

Wir haben nun also

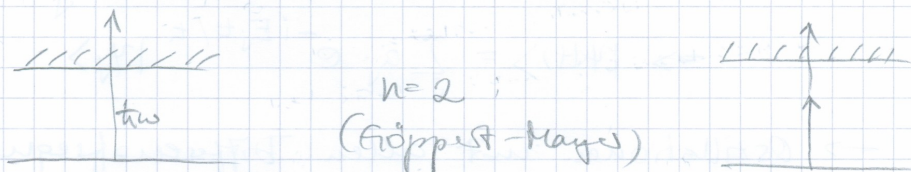
$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = [H_0 + W(t)] |\psi(t)\rangle$$

- falls $W(t)$ klein \rightarrow zeitliche Störungstheorie

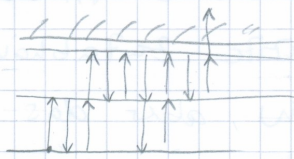
Beispiel: im Fall eines Laserfeldes ist in LE

$$W(t) \sim \vec{r} \cdot \vec{E} \sin \omega t$$

und n -te Ordnung Störungstheorie beschreibt Prozesse, an denen n Photonen beteiligt sind, z.B. $n=1$, Photoeffekt



Für große n wird Störungstheorie schnell unübersichtlich und beinhaltet vielerlei Prozesse



ein Ionisationsprozess in $n=13$ ter Ordnung Störungstheorie, bei dem effektiv aber nur 3 Photonen absorbiert werden.

relevantes kleineres Parameter.

$$\text{Feinstk-} \left(\frac{2\pi \hbar I}{\hbar e^2} \right)^n \xrightarrow{\text{Lasersintensität}} \text{konst} \stackrel{\text{a.u.}}{=} \left(\frac{2\pi I}{137} \right)^n = \left(\frac{2\pi E^2}{137} \right)^n$$

$$\frac{2\pi E^2}{137} > 1 \Rightarrow \text{bei } I \approx 7 \cdot 10^{17} \frac{\text{W}}{\text{cm}^2} \text{ spätestens}$$

stellt sich die Frage der Konvergenz
Vergleich mit numerisch exakt berechneten
Raten zeigt, daß schon bei 10^{12} W/cm^2
LOPT (lowest order perturbation theory)
nicht ausreicht

\Rightarrow Wir brauchen andere Methoden!

N.B.: • Es gibt auch \textcircled{D} ohne explizit zeitabh.
äußeres Feld, wenn man das System
in eine Überlagerung von Eigen-
ständen bringt

$$H_0 |\varphi_j\rangle = E_j |\varphi_j\rangle$$

$$i\hbar \partial_t |\varphi(t)\rangle = H_0 |\varphi(t)\rangle, \quad |\varphi(0)\rangle = \sum_j a_j |\varphi_j\rangle$$

$$\Rightarrow |\varphi(t)\rangle = \sum_j a_j e^{-iE_j t/\hbar} |\varphi_j\rangle$$

\rightarrow Oszillationen mit allen Differenzfrequenzen,
„revivals“, „quantum aspers“ FOCIE

• Wenn man das el. magn. Feld quantisieren
würde, hätte man diese Situation: es
gäbe keine explizite Zeitabhängigkeit
mehr in $H = H_0 + W$, aber das quantisierte
el. magn. Feld wäre in einer Überlagerung

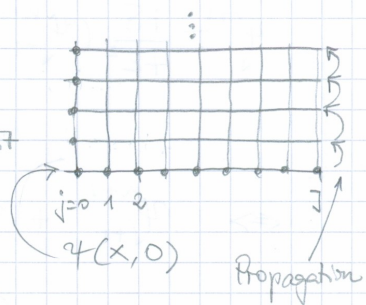
von Fock-Zuständen. Man kann zeigen, daß bei hohen Erwartungswerten der Photonenzahl die ^{rel.} Unscharfe des el. magu. Feldes $\Delta E / \bar{E}$ vernachlässigbar klein ist
 → keine Notwendigkeit, das Feld zu quantisieren.

Numerische Integration der räumlich eindimensionalen, zeitabhängigen Schrödingers-Gleichung

In a.u. $i\partial_t \psi(x,t) = \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x,t) \right) \psi(x,t)$

Randbedingung (reflektierend) $0 \leq x \leq L, \psi(0,t) = 0, \psi(L,t) = 0$

Gitter $x = j\epsilon, j = 0, 1, \dots, J$
 $t = n\delta, n = 0, 1, \dots$
 $\psi(x,t) \rightarrow \psi_j^n$



Diskretisierung der Ableitungen

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x,t) = \frac{1}{\epsilon^2} (\psi_{j-1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j+1}^n) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

$$\frac{d}{dx} \psi(x,t) = \frac{1}{\epsilon} (\psi_{j+1}^n - \psi_{j-1}^n) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

Zeitentwicklung für einen Zeitschritt

$$\psi(x,t+\delta) \cong e^{-i\delta H(t+\delta/2)} \psi(x,t)$$

↑
Zeitordnung vernachlässigt

Man beachte: $e^{-i\delta H} = 1 - i\delta H + \mathcal{O}(\delta^2)$
 zerstört Unitarität, daher besser

$$e^{-i\delta H} = \frac{1 - i\delta H/2}{1 + i\delta H/2} + \mathcal{O}(\delta^3)$$

verwenden, da $e^{i\delta H}$ unitär.

Aber: H im Nenner \rightarrow implizites Algorithmus:

$$\psi_j^{n+1} = \frac{1 - i\delta H/2}{1 + i\delta H/2} \psi_j^n$$

$$(1 + i\delta H/2) \psi_j^{n+1} = (1 - i\delta H/2) \psi_j^n \quad (*)$$

$$\text{und } H\psi_j^n = -\frac{1}{2\varepsilon^2} (\psi_{j-1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j+1}^n) + V_j^n \psi_j^n$$

$$\text{wobei } V_j^n = V(j\varepsilon, (n + \frac{1}{2})\delta)$$

(*) \Rightarrow

$$\left[\begin{aligned} \psi_j^{n+1} - \frac{i\delta}{4\varepsilon^2} (\psi_{j-1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j+1}^{n+1}) + \frac{i\delta}{2} V_j^n \psi_j^{n+1} \\ = \psi_j^n + \frac{i\delta}{4\varepsilon^2} (\psi_{j-1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j+1}^n) - \frac{i\delta}{2} V_j^n \psi_j^n \end{aligned} \right.$$

$$\Leftrightarrow \psi_{j+1}^{n+1} + \psi_j^{n+1} \left(\frac{4\varepsilon^2 i}{\delta} - 2 - 2\varepsilon^2 V_j^n \right) + \psi_{j-1}^{n+1} = \Omega_j^n \quad (\otimes)$$

$$\Omega_j^n = -\psi_{j+1}^n + \left(\frac{4\varepsilon^2 i}{\delta} + 2 + 2\varepsilon^2 V_j^n \right) \psi_j^n - \psi_{j-1}^n$$

Dies ist eine sog. zweigliedrige Rekursion.

Sei zur Zeit n der inhomogene Term Ω_j^n (für alle Orte j) gegeben. Mit dem Ansatz

$$\psi_{j+1}^{n+1} = e_j^n \psi_j^{n+1} + f_j^n \quad (\dagger)$$

Soll die zweigliedrige Rekursion in zwei eingliedrige Rekursionen überführt werden. (\dagger) in (\otimes) einsetzen und nach ψ_j^{n+1} auflösen

$$\psi_j^{n+1} = \left(2 + 2\varepsilon^2 V_j^n - e_j^n - \frac{4i\varepsilon^2}{\delta} \right)^{-1} \left[\psi_{j-1}^{n+1} + (f_j^n - \Omega_j^n) \right] \quad (0)$$

(0) gleiche Struktur wie (+), aber für Ort j statt $j+1$

$$\Rightarrow e_{j-1}^n = \left(2 + 2\varepsilon^2 V_j^n - e_j^n - \frac{4i\varepsilon^2}{\delta} \right)^{-1} \quad (1)$$

$$f_{j-1}^n = \left(2 + 2\varepsilon^2 V_j^n - e_j^n - \frac{4i\varepsilon^2}{\delta} \right)^{-1} (f_j^n - \Omega_j^n) \quad (2)$$

(1) nach e_j^n auflösen

$$e_j^n = 2 + 2\varepsilon^2 V_j^n - \frac{4i\varepsilon^2}{\delta} - \frac{1}{e_{j-1}^n} \quad (3)$$

(3) in (2) und nach f_j^n auflösen

$$f_j^n = \Omega_j^n + \frac{f_{j-1}^n}{e_{j-1}^n} \quad (4)$$

(3) und (4) sind zwei eingliedrige Rekursionen, für die wir noch je eine Startbedingung brauchen.

Betrachte (x) für $j=1$ ($\psi_{j-1} = \psi_0 = 0 \quad \forall n$)

$$\Rightarrow \psi_2^{n+1} = \underbrace{\left(2 + 2\varepsilon^2 V_1^n - \frac{4\varepsilon^2 i}{\delta} \right)}_{e_1^n} \psi_1^{n+1} + \underbrace{\Omega_1^n}_{f_1^n}$$

Damit haben wir alle e_j^n und f_j^n . Um von n nach $n+1$ zu kommen, betrachten wir die andere Randbedingung $\psi_j^n = 0 \quad \forall n$, $L = J\varepsilon$.

$$(+) \Rightarrow \psi_{j-1}^{n+1} = - \frac{f_{j-1}^n}{e_{j-1}^n}$$

$$\text{und } \psi_j^{n+1} = \frac{\psi_{j+1}^{n+1} - f_j^n}{e_j^n}$$

Algorithmus (Goldberg, Schey & Schwartz, Crank-Nicolson) ¹⁰

1. Vorgabe von V_j^n und ψ_j^0

2. Berechnung des c_j^n :

$$c_1^n = 2 + 2\varepsilon^2 V_1^n - \frac{4i\varepsilon^2}{\delta}$$

$$c_j^n = 2 + 2\varepsilon^2 V_j^n - \frac{4i\varepsilon^2}{\delta} - \frac{1}{c_{j-1}^n} \quad \text{für } j=2,3,\dots,J-1$$

3. Berechnung des Ω_j^n aus

$$\Omega_j^n = -\psi_{j+1}^n + \left(\frac{4i\varepsilon^2}{\delta} + 2\varepsilon^2 V_j^n + 2 \right) \psi_j^n - \psi_{j-1}^n$$

$$\text{für } j=1,2,\dots,J-1$$

4. Berechnung des f_j^n aus

$$f_1^n = \Omega_1^n$$

$$f_j^n = \Omega_j^n + \frac{f_{j-1}^n}{c_{j-1}^n} \quad \text{für } j=2,3,\dots,J-1$$

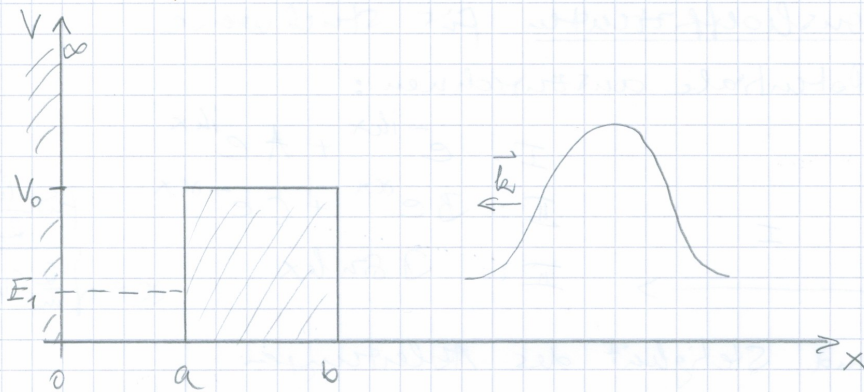
5. Berechnung der Wellenfunktion für den nächsten Zeitschritt

$$\psi_{j-1}^{n+1} = -\frac{f_{j-1}^n}{c_{j-1}^n}$$

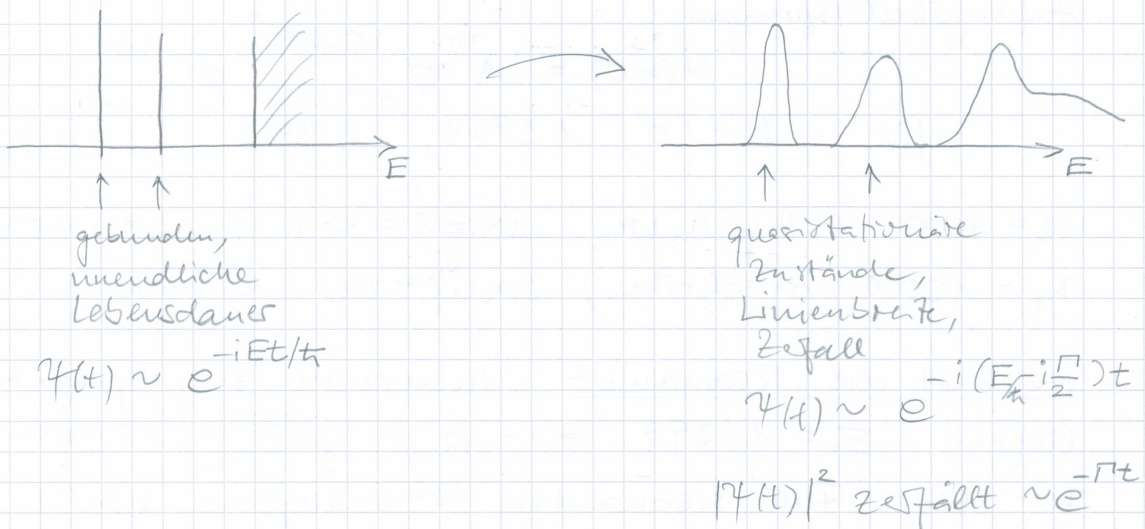
$$\psi_j^{n+1} = \frac{\psi_{j+1}^{n+1} - f_j^n}{c_j^n} \quad \text{für } j=J-2, J-3, \dots, 1$$

- Grundzustände kann man durch imaginäre Zeitpropagation ($\delta \rightarrow -i\delta$) finden, angeregte Zustände durch Gram-Schmidt-Orthogonalisierung
- Verallgemeinerung auf mehrdimensionale Probleme durch „Split-Operator“-Methoden möglich. FOLIEN

Beispiel: Reflexion an einer Barriere (mit Resonanzen)

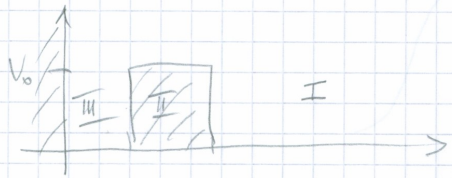


hier gibt es keine gebundenen Zustände. E_1 soll den Eigenzustand für $b \rightarrow \infty$ andeuten.
 Für endliche b kann ein Teilchen aus dem Bereich $[0, a]$ heraustunneln (vgl. α -Zerfall).
 Man nennt solche quasistationären Zustände auch Resonanzen (Gamow-Theorie).



Wie müssen wir von rechts auf die oben abgebildete Barriere schießen, damit möglichst viel Wahrscheinlichkeitsdichte gefangen bleibt?
 Klassisch unmöglich, da Teilchen entweder bei $x=b$ oder bei $x=0$ reflektiert wird, abhängig von der Energie.

„Analytische“ Möglichkeit, Reflexions- u. Transmissionskoeffizienten für stückweise konstante Potentiale anzurufen:



$$\begin{aligned}
 \text{I: } & e^{-ikx} + A e^{ikx} \\
 \text{II: } & B e^{\alpha x} + C e^{-\alpha x} \quad \text{für } \frac{\hbar^2}{2} < V_0 \\
 \text{III: } & D e^{ikx} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - \frac{\hbar^2}{2})}{\hbar^2}}
 \end{aligned}$$

Stetigkeit und Stetigkeit der Ableitungen an den Grenzen I-II, II-III \Rightarrow 4 Gleichungen zur Bestimmung von A, B, C, D.

„Erfangwahrscheinlichkeit“ $\sim |D|^2$

Wellenpaket aus Überlagerung von Eigenlösungen zusammensetzen; sehr mühsam!

Numerische Resultate für $V_0 = 3$, $a = \frac{\pi}{2}$, $b = a + 2$.

Anfangsbedingungen:

$$\psi(x, 0) = A e^{-\frac{(x-100)^2}{100}} e^{-ikx}$$

für $k = 1.0, 1.5747, 2.449$. (a.u.)

$N_x = 4000$ Gitterpunkte, $\Delta x = \varepsilon = 0.1$, $\Delta t = \delta = 0.025$

$N_t = 15000$ Zeitschritte, Laufzeit < 1 min

Wo liegt die Resonanz? Imaginäre Zeitpropagation liefert $E_1 = 1.2399 \Rightarrow k = \sqrt{2E_1} = 1.5747$.

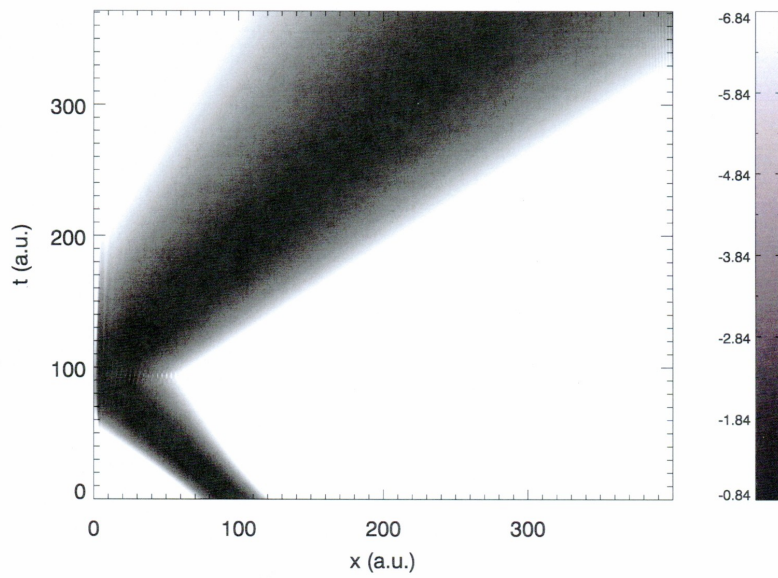
Für diesen Fall resonanten Einschießens bleibt relativ viel Wahrsch. dichte gefangen, tunnelt aber wieder heraus (grauer Bereich im Konturplot (b)).

Beachte: Wellenpaket räumlich breit ($\sqrt{100} = 10$)

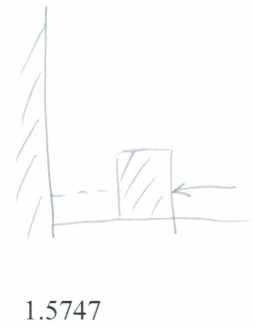
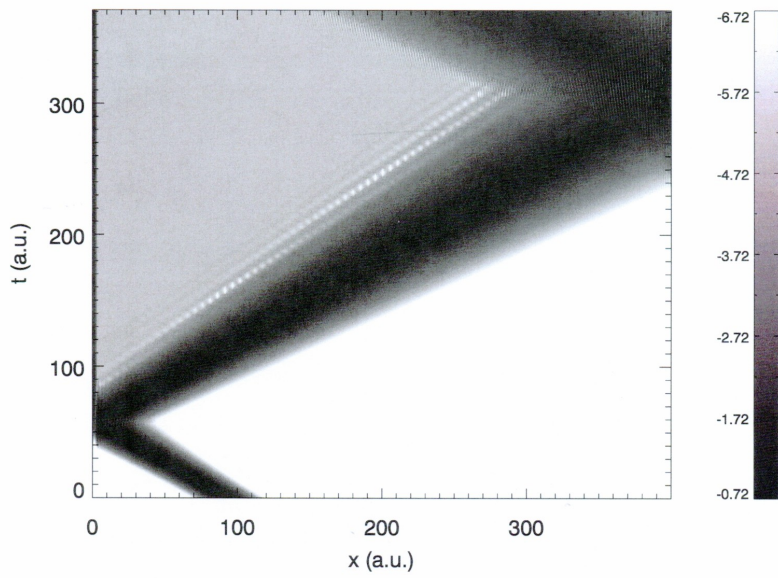
\rightarrow im Impulsraum schmal, sodass es relativ langsam zerfließt.

ANIMATION

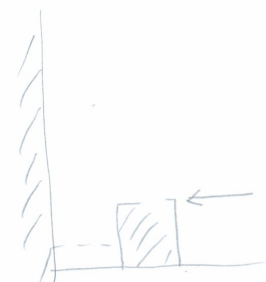
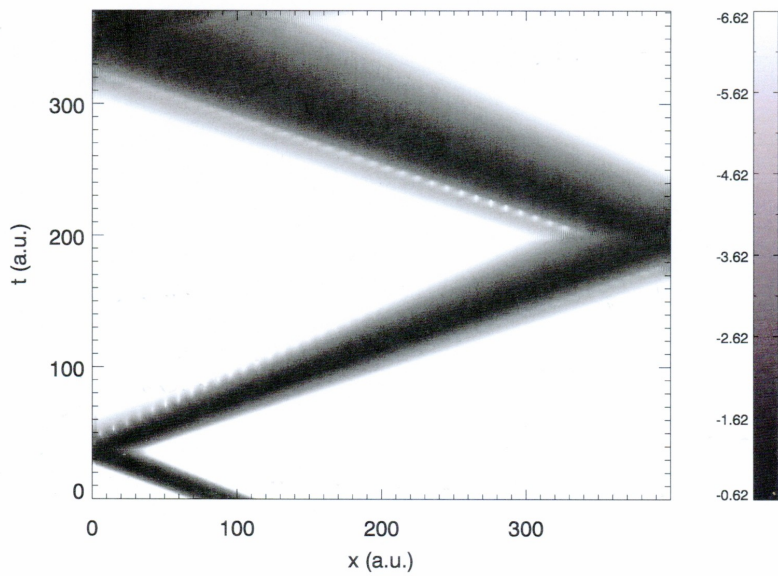
(a)



(b)



(c)



Zusammenhang zwischen klassischer und Quantendynamik

B

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left\langle \frac{d\psi}{dt} | A | \psi \right\rangle + \langle \psi | A \frac{d\psi}{dt} \rangle + \langle \psi | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi \rangle$$

Schrödinger-Gleichung: $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi | = - \langle \psi | H$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi | H A | \psi \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \psi | A H | \psi \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

Für $\frac{\partial A}{\partial t} = 0 \Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle \psi | [A, H] | \psi \rangle$

(Ehrenfest)

und speziell für Ort q und Impuls p

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle q \rangle = \langle \psi | [q, H] | \psi \rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle p \rangle = \langle \psi | [p, H] | \psi \rangle$$

Für Hamiltonian $H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$ und

$$[q, H(q, p)] = i\hbar \frac{\partial H}{\partial p}, \quad [p, H(q, p)] = -i\hbar \frac{\partial H}{\partial q}$$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle q \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial q} \right\rangle$$

Das sieht zwar klassisch aus, aber zur Bestimmung der „Schwerpunktbewegung“ benötigen wir die Wellenfunktion, da im Allgemeinen

$$\left\langle -\frac{\partial V}{\partial q} \right\rangle \neq -\frac{\partial V(\langle q \rangle)}{\partial \langle q \rangle}$$

Gibt es Fälle, wo $\left\langle -\frac{\partial V}{\partial q} \right\rangle = -\frac{\partial V(\langle q \rangle)}{\partial \langle q \rangle}$, sodass man ohne Berechnung der Wellenfunktion die Dynamik der Erwartungswerte $\langle q \rangle$, $\langle p \rangle$ berechnen kann?

Entwicklung ^{von V'} um den Erwartungswert

14

$$V'(q) = \frac{\partial V(q)}{\partial q} = V'(\langle q \rangle) + (q - \langle q \rangle) V''(\langle q \rangle) + \frac{1}{2} (q - \langle q \rangle)^2 V'''(\langle q \rangle) + \dots$$

$$\Rightarrow \langle V'(q) \rangle \approx V'(\langle q \rangle) + 0 + \frac{1}{2} (\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2) V'''(\langle q \rangle)$$

\Rightarrow Für Potentiale $V = \text{const.}$, χ

$$V = \text{const.} + aq$$

$$V = \text{const.} + aq + bq^2$$

gilt $\frac{d}{dt} \langle q \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}$, $\frac{d}{dt} \langle p \rangle = - \frac{\partial V(\langle q \rangle)}{\partial \langle q \rangle}$,

d.h. die Erwartungswerte verhalten sich wie klassische Teilchenbahnen! Dies gilt näherungsweise für fast harmonische Potentiale, solange die Unschärfe $\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2$ klein bleibt (d.h. für „kompakte“ Wellenpakete mit wenig Dispersion).

Näherung für $V'''(\langle q \rangle) \neq 0$: wir schreiben

$$\chi = \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2$$

und suchen Bewegungsgleichungen für $\langle q \rangle$, $\langle p \rangle$ und χ .

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \chi &= \frac{1}{i\hbar} \langle [q^2, H] \rangle - 2 \langle q \rangle \frac{1}{i\hbar} \langle [q, H] \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \underbrace{q [q, H] + [q, H] q}_{i\hbar p} - 2 \langle q \rangle [q, H] \rangle \\ &= \frac{1}{m} \langle qp + pq - 2 \langle q \rangle p \rangle \\ &= \frac{1}{m} \{ \langle qp + pq \rangle - 2 \langle q \rangle \langle p \rangle \} \end{aligned}$$

Wir wissen ^{leider} nicht, was $\langle qp + pq \rangle$ ist, ohne die Wellenfunktion zu kennen.

Daher versuchen wir es mit der zweiten Ableitung¹⁵:

$$\frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{m} \left\{ \langle [q, p, H] \rangle + \langle [p, q, H] \rangle - 2 \langle q \rangle \langle [p, H] \rangle - 2 \langle p \rangle \langle [q, H] \rangle \right\}$$

Die Kommutatoren kann man für explizit zeitunabh. Hamiltonians leicht auswerten. Vernachlässigt man in der Gleichung für $\langle x \rangle$ V'' und höhere Ableitungen, so erhält man

$$\frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} \approx \frac{2}{m^2} \left\{ \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 - m V''(\langle q \rangle) \langle x \rangle \right\} \quad (*)$$

Um $\langle p^2 \rangle$ auszurechnen, müssten wir wiederum die Wellenfunktion wissen, aber, betrachtet man die „Nullpunktsenergie“ (funktioniert nur bei expl. zeitunabh. H)

$$E = \langle H \rangle - E_{cl} = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \langle V(q) \rangle - \underbrace{\frac{\langle p \rangle^2}{2m} - V(\langle q \rangle)}_{\approx \frac{1}{2} \langle x \rangle V''(\langle q \rangle)}$$

$$\Rightarrow E = \frac{1}{2m} \left\{ \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 + m V''(\langle q \rangle) \langle x \rangle \right\}$$

E ist wegen der Energieerhaltung eine Erhaltungsgröße, d.h. es reicht aus E zum Anfangszeitpunkt $t=0$ mit der Anfangswellenfunktion einmalig zu berechnen. $\langle p^2 \rangle$ in (*) kann durch E eliminiert werden, und die „Quantenbewegungsgleichungen“ lauten

$$\begin{aligned} \langle \dot{q} \rangle &= \langle p \rangle / m, & \langle \dot{p} \rangle &= -V'(\langle q \rangle) - \frac{1}{2} V'''(\langle q \rangle) \langle x \rangle \\ \ddot{x} &= \frac{4}{m} \left\{ E - V''(\langle q \rangle) \langle x \rangle \right\} \end{aligned}$$

Die Anfangsbed. $\langle q \rangle(0)$, $\langle p \rangle(0)$, $\langle x \rangle(0)$, $\langle \dot{x} \rangle(0)$ berechnen sich aus der Anfangswellenfunktion $\psi(0)$.

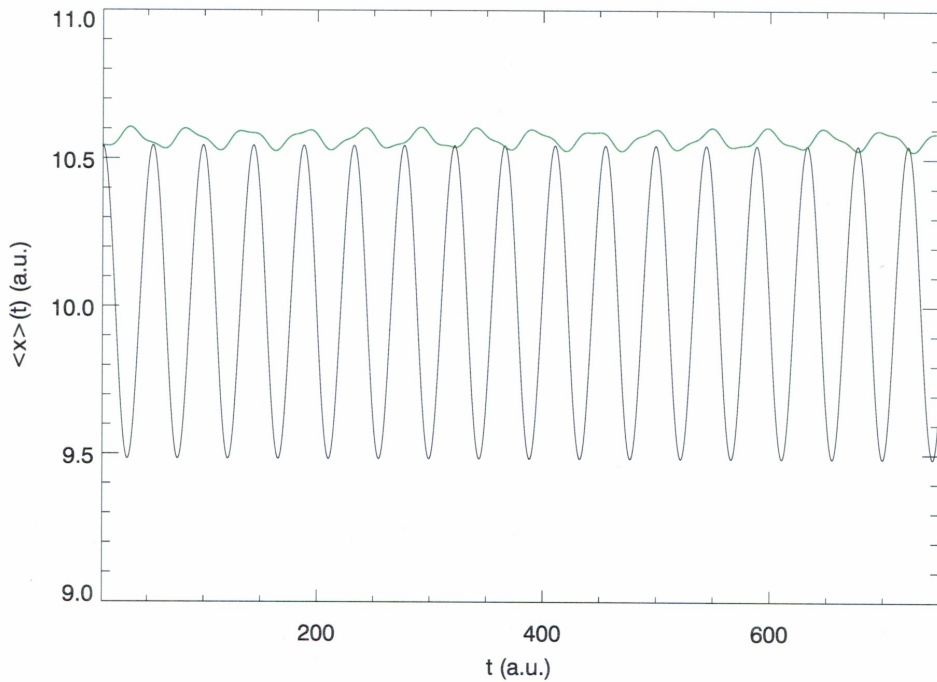
Beispiel · Morse-Potential

15.4

$$V(x) = (1 - e^{-a(x-b)})^2$$

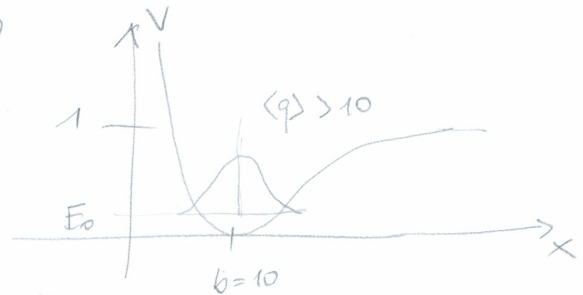
$$a = 1/10, \quad b = 10 \quad (E_0 = 6.95 \cdot 10^{-2})$$

System befindet sich im Grundzustand.



Schwarz: Nur $\langle \dot{q} \rangle = \langle p \rangle$ ($m=1$)
 $\langle \dot{p} \rangle = -V'(\langle q \rangle)$

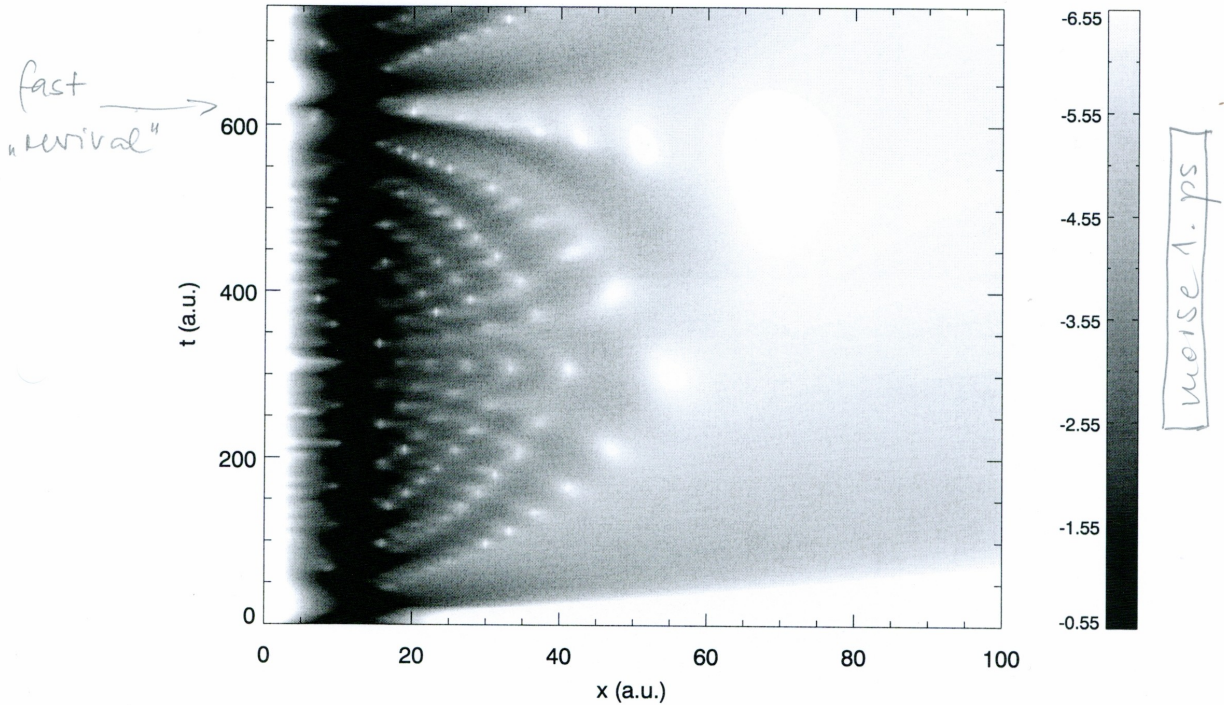
Oszillation, da $\langle q \rangle > b$



\Rightarrow klassisches Teilchen oszilliert um $b \approx 10$.

Grün: $\langle \dot{q} \rangle = \langle p \rangle$ $\langle \dot{p} \rangle = -V'(\langle q \rangle) - \frac{1}{2} V''(\langle q \rangle) \chi$
 $\ddot{\chi} = 4(\epsilon - V''(\langle q \rangle) \chi)$

$$\left(\chi = \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2, \quad \epsilon = \langle H \rangle - E_0 \right. \\ \left. = \langle H \rangle - \left(\frac{\langle p \rangle^2}{2} + V(\langle q \rangle) \right) \right)$$

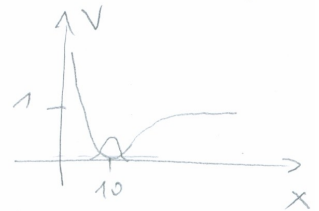


Beispiel: Morse-Potential

$$V(x) = (1 - e^{-a(x-b)})^2$$

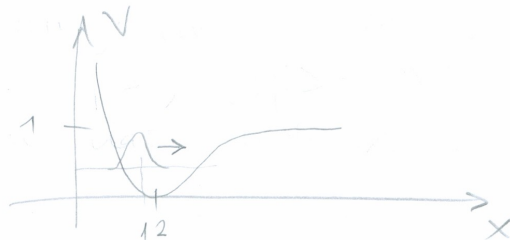
für $a = \frac{1}{10}$, $b = 10$

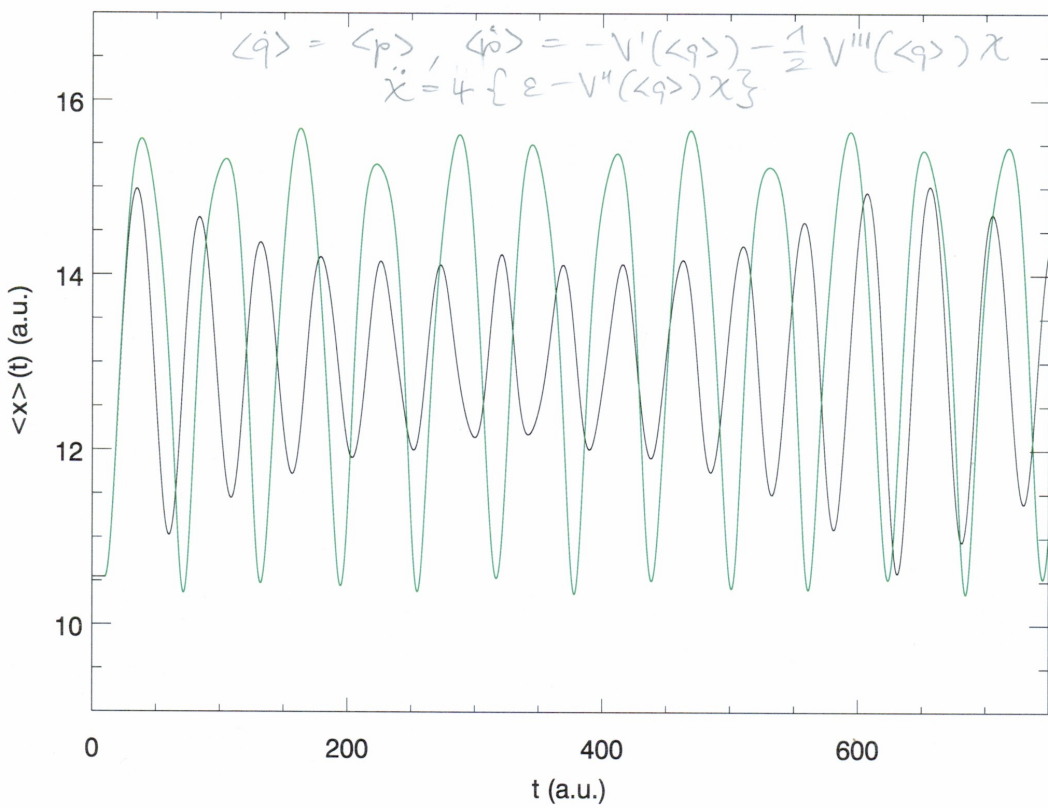
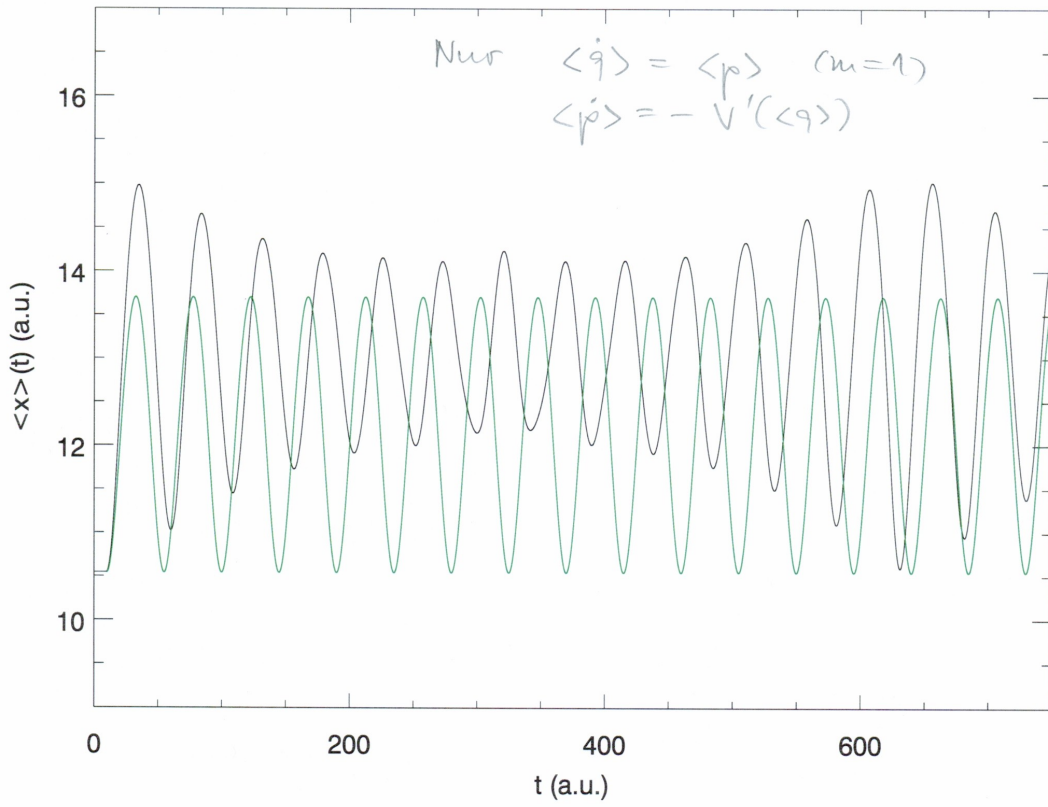
($E_0 = 6.95 \cdot 10^{-2}$)



Zur Zeit $t=10$ wird b von 10 auf 12 geändert \Rightarrow ψ nicht mehr Grundzustand
 \Rightarrow Dynamik

und hier





[more without without chi - eps]

HJ:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V + Q = 0 \quad (+)$$

$$V(x,t) \quad Q(S; x, t)$$

klassische HJ-Gleichung: $Q=0$ (ist aber nicht das klassische Grenzfall!)
 Q heißt Quantenpotential (\sim Krümmung der Amplitude)

$$Q = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{A''}{A} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi^{-1/2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^{1/2}$$

Neuartige Interpretation der Quantentheorie durch David Bohm in den 1950er Jahren. Beispiel für eine nicht-lokale "hidden variable"-Theorie.

Klassische HJ-Gl. \Leftrightarrow Newton'sche Mechanik \Leftrightarrow Trajektorien
 Quanten HJ-Gl. \Leftrightarrow Quantentrajekt.

Berechnung von Q erfordert Berechnung von ψ .

Kann man das, ohne die Schrödingers-Gl. zu lösen? Dann wäre Bohm'sche Mechanik nicht nur eine Interpretation, sondern evtl. auch nützlich zum Rechnen.

$$\frac{\partial}{\partial x} \text{ von } (+) \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 = -\frac{\partial}{\partial x} (V+Q)$$

"Quantenkraft"

$$m \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} \right) = -\frac{\partial}{\partial x} (V+Q)$$

klassische Kraft

$$\frac{dv}{dt}$$

(Lagrange'sche Zeitableitung)

$$\Rightarrow m\dot{v} = f_a + f_q, \quad f_a = -\frac{\partial V}{\partial x}, \quad f_q = -\frac{\partial Q}{\partial x}$$

Idee: Berechne viele viele Trajektorien (gewichtet durch die Anfangswellenfunktion). Wellenfunktion zu einem späteren Zeitpunkt:

Kontinuitätsgleichung

Euler'sch:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho v) = 0 \quad (6)$$

$= \frac{1}{m} \frac{\partial S}{\partial x} = v(x,t)$

Lagrange'sch:

$$\frac{d}{dt} \rho(x(t), t) = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{dx}{dt}$$
$$\stackrel{(6)}{=} - \rho \frac{\partial v}{\partial x}$$

=> im mitgeführten System $\rho(t+\Delta t) = e^{-\frac{\partial v}{\partial x} \Delta t} \rho(t)$

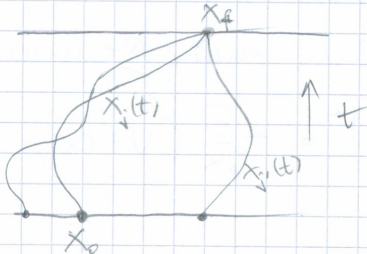
$$A(t+\Delta t) = e^{-\frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial x} \Delta t} A(t)$$

Wirkung

$$S(x(t)) = S(x(t_0)) + \int_{t_0}^t L_q(x(\tau)) d\tau$$

Lagrangian $L_q = T - (V+Q)$

Betrachte eine Bahn j , welche bei $x_j(t_0) = x_0$ startet und bei $x_j(t_f) = x_f$ endet.



Dessen Beitrag zur Wellenfunktion $\Psi(x_f, t_f)$

Auswandeläufen benachbarter Bahnen

$$\Psi(x_j(t_f)) = \Psi(x_j(t_0)) e^{-\frac{i}{2} \int_{t_0}^{t_f} \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)_{x_j(\tau)} d\tau} \times e^{i \int_{t_0}^{t_f} L_q(x_j(\tau)) d\tau}$$

Phase

Um die Wellenfunktion $\Psi(x_f, t_f)$ zu rekonstruieren, muss man alle Bahnen j finden, die zur Zeit t_f bei x_f ankommen und ihre Beiträge $\Psi(x_j(t_f))$ kohärent superponieren \rightarrow Interferenz

Beispiele: Wie sieht ein Grundzustand in der Bohrschen Interpretation aus?

Z.B. 1) harmonischer Oszillator (a.u.)

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\omega/2 \cdot x^2}, \quad \psi(x,t) = \psi_0(x) e^{-iE_0 t}$$

$$E_0 \psi_0 = \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2\right) \psi_0$$

Offenbar ist $A(x,t) = A(x) = \psi_0(x)$

Quantenpotential

$$Q = -\frac{1}{2} \frac{A''}{A}, \quad A' \sim -\frac{\omega}{2} \cdot 2x e^{-\omega x^2/2}$$

$$A'' \sim -\omega e^{-\omega x^2/2} (1 - \omega x^2) \\ = \omega e^{-\omega x^2/2} (\omega x^2 - 1)$$

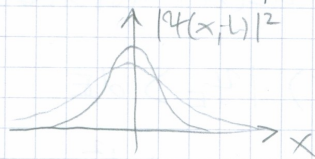
$$\Rightarrow Q = -\frac{1}{2} \omega (\omega x^2 - 1)$$

$$\Rightarrow V + Q = \frac{1}{2} \omega^2 x^2 - \frac{1}{2} \omega^2 x^2 + \frac{1}{2} \omega = \frac{1}{2} \omega$$

$\Rightarrow f_V + f_Q = 0 \Rightarrow$ Bohm-Teilchen ruhen!

Ein zweifließendes Wellenpaket ($k=0$)

$$\psi(x,t) = \frac{A}{\sqrt{1 + i t/a^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2(1 + i t/a^2)}\right)$$

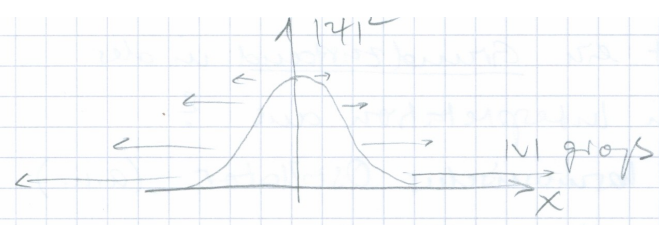


$$= \frac{A}{\sqrt{1 + (t/a^2)^2}} \exp\left[-\frac{x^2(1 - i t/a^2)}{2a^2(1 + (t/a^2)^2)}\right]$$

Offenbar ist $S(x,t) = \bar{S}(t) + \tilde{S}(x,t)$

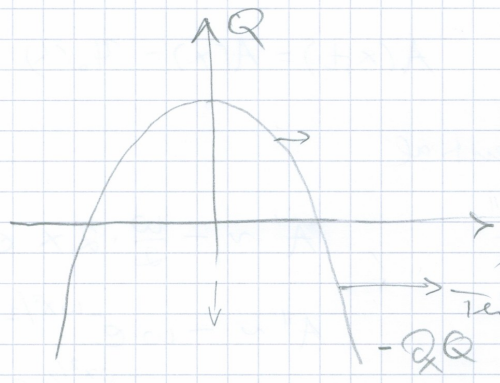
$$\tilde{S}(x,t) = \frac{x^2 t}{2a^4(1 + (t/a^2)^2)}$$

$$v = \frac{\partial S}{\partial x} = \frac{x t}{2a^4(1 + (t/a^2)^2)} \quad \text{zu vorgegebenem } t$$



Q ähnlich wie im ersten Beispiel
mit $\omega \rightarrow \omega(t)$ und ohne V

=>



umgedrehtes
harmonisches
Potential, das
breiter wird und
sich nach unten
bewegt.
Teilchen werden durch
-Q beschleunigt.

Doppelspalt: Abb. aus C. Philippidis et al., Nuovo Cim. 71 B, 75 (1982)

Berechnung von Energiespektren

Wir kommen nun zurück auf die Lösung der zeitabhängigen Schrödingers-Gleichung. Wir haben einen Algorithmus diskutiert, mit dem wir effizient die Wellenfunktion propagieren können. Häufig ist es von Interesse, das Spektrum nach der Propagation zu bestimmen.

Entwicklung in ungestörten Eigenzuständen:

$$|\psi(t_f)\rangle = \int a(E) |\psi_E\rangle dE$$

Spektrum $P(E) = |\langle \psi_E | \psi(t_f) \rangle|^2$
 $= |\langle \psi_E | \int a(E') |\psi_{E'}\rangle dE'|^2$
 $= |a(E)|^2$

= Wahrscheinlichkeit, daß System in Zustand $|\psi_E\rangle$