

Wh.: Harmonischer Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2} \hat{x}^2$$

Beschreibung durch Leiteroperatoren \hat{b}, \hat{b}^+

$$\hat{b} := \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}} \hat{p}$$

$$\hat{H} = \hbar\omega_0 \left(\hat{b}^+ \hat{b} + \frac{1}{2} \mathbb{1} \right) = \hbar\omega_0 \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \mathbb{1} \right)$$

Kommutatorrelationen:

$$[\hat{b}, \hat{b}^+] = \mathbb{1} \quad [\hat{b}, \hat{N}] = \hat{b}$$

Eigenzustände $\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle$

$$\hat{b}|n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$\hat{b}^+|n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

Grundzustand $|0\rangle, \hat{H}|0\rangle = \hbar\omega_0/2 |0\rangle$

Frage: Eigenzustände mit nicht-ganzzahligen n ?

Also: $\hat{N}|\psi\rangle = (n+x)|\psi\rangle, \text{ mit } n \in \mathbb{N}$
 $0 < x < 1$

es folgt:

$$\hat{N} (\hat{b}^+)^m |\psi\rangle = [-m \cdot \hat{b}^+ \hat{b} + \hat{b}^+ \hat{N}] (\hat{b}^+)^m |\psi\rangle$$

$$= (-m + n + x) (\hat{b}^+)^m |\psi\rangle \Rightarrow \hat{b}^+)^m |\psi\rangle \text{ ist selbst}$$

und Eigenzustand von \hat{N}

und

$$\langle \hat{b}^+)^{m+1} \psi | \hat{b}^+)^{m+1} \psi \rangle = \langle \hat{b}^+)^m \psi | \underbrace{\hat{b}^+ \hat{b}}_{\hat{N}} | \hat{b}^+)^m \psi \rangle$$

$$= \underbrace{(-m + n + x)}_{\hat{N}} \langle \hat{b}^+)^m \psi | \hat{b}^+)^m \psi \rangle$$

$\neq 0$

\Rightarrow Norm des Zustandes $\hat{b}^{n+1}|\psi\rangle$ existiert, falls die Norm des Zustandes $\hat{b}^n|\psi\rangle$ existiert, für beliebige $n \in \mathbb{N}$.

Aber: Faktor $(-m\omega_0 + x)$ kann negativ werden, wenn $n \geq n+1$.

\rightarrow Widerspruch zur Tatsache, dass Eigenwerte von N positiv sein müssen.

$$\langle n|N|n\rangle = \langle n|\hat{b}^\dagger\hat{b}|n\rangle = \langle \hat{b}n|\hat{b}n\rangle \geq 0$$

\Rightarrow Es kann keine normierbaren EZ von N mit nicht-ganzzahligen Eigenwert geben!

IV. 2 Ortsdarstellung

gesucht: Ortsraumwellenfunktion $\varphi_n(x) = \langle x|n\rangle$

betrachte Wirkung der Leiteroperatoren in Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned}\hat{b}^+ \varphi_n(x) &= \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}} \hat{p} \right) \varphi_n(x) \\ &= \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} x + \frac{x}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}} \frac{\hbar}{x} \frac{d}{dx} \right) \varphi_n(x) \quad \text{reell}\end{aligned}$$

analog:

$$\hat{b}^- \varphi_n(x) = \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} x - \frac{\hbar}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}} \frac{d}{dx} \right) \varphi_n(x)$$

Führe neue Variable ein: $\xi := \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} x$

$$\hat{b}^+ \varphi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \varphi_n(\xi)$$

$$\hat{b}^- \varphi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \varphi_n(\xi)$$

Konstruktion des Grundzustands:

$$\hat{b} |0\rangle \stackrel{!}{=} "0"$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \varphi_0(\xi) \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{d\varphi_0(\xi)}{d\xi} = -\xi \varphi_0(\xi) \quad \text{Lsg.: } \varphi_0 = e^{-\xi^2/2}$$

$$\Rightarrow \varphi_0(\xi) = c_0 e^{-\xi^2/2} \quad \text{Lsg. der DGL zum Grundzustand.}$$

\uparrow
 Normierungskonstante

bzw.

$$\varphi_0(x) = c_0 e^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar} x^2} \quad \text{GE-Wellenfunktion des HO's ist eine Gaußfunktion.}$$

Festlegung von c_0 aus Normierung:

$$1 \stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_0^*(x) \varphi_0(x) = c_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega_0}{\hbar} x^2} = c_0^2 \sqrt{\frac{\pi \hbar}{m\omega_0}}$$

$$\Rightarrow c_0 = \left(\frac{m\omega_0}{\pi \hbar} \right)^{1/4}$$

\Rightarrow normierte Grundzustandswellenfunktion

$$\boxed{\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega_0}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar} x^2}}$$

Konstruktion der angeregten Zustände durch Benutzen von

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^\dagger)^n |0\rangle$$

$$\Rightarrow \varphi_n(\xi) = \frac{c_0}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2}$$

Es ergibt sich:

$$\psi_n(\xi) = \frac{C_0}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

mit $\xi = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} x$

$$C_0 = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

mit $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$ Hermite-Polynome

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 2\xi^2 - 2, \dots$$

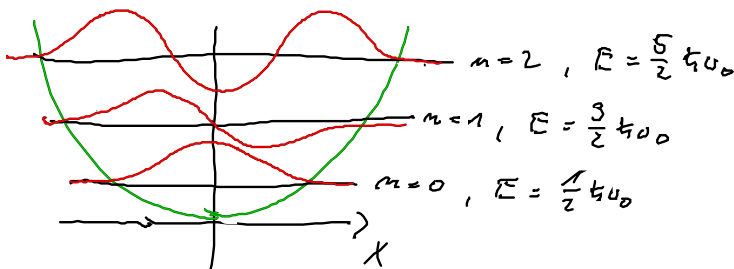
Beachte: $H_n(-\xi) = (-1)^n H_n(\xi)$

$$\psi_n(-\xi) = (-1)^n \psi_n(\xi)$$

n gerade \Rightarrow Wellenfunktion mit gerader Parität

n ungerade \Rightarrow " " ungerade "

- konsistent mit dem symm. Potential (wie beim Kastenpot.)



$\Rightarrow \psi_n$ oszillatorisch in dem klassisch erlaubten Gebiet.

$$\lim_{\substack{x \rightarrow \infty \\ x \rightarrow -\infty}} \psi_n(x) = 0$$

Nachbemerkung zur Nullpunktsenergie

$$E_0 = \frac{\hbar \omega_0}{2}$$

Quantenmechanisch ist $E=0$ unmöglich.

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \stackrel{!}{=} 0 \quad (\text{klassisch})$$

$\Rightarrow x=0, p=0$ (Ruhelage)

Würde die Unschärferelation verletzen!

$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$! \Rightarrow "Nullpunktsenergie"

- Makroskopische Systeme:

Frequenzen ω_0 sind so klein, dass $\frac{\hbar \omega_0}{2}$ verschwindend klein ist.

\Rightarrow Quantisierung für makroskopische Systeme kaum messbar.

V. Dynamik von Quantensystemen

Problemstellung:

Durch Messung zur Zeit t_0 sei der Zustand $|\psi(t_0)\rangle$ bekannt.

Frage: welche Aussagen können wir für den Zustand und Observablen zur Zeit $t > t_0$ machen?

Nehmen wir dazu an, dass das System nicht durch andere Messungen gestört wird.

V.1 Zeitentwicklung von Erwartungswerten, Ehrenfest'sche Theorem

betrachte Observable \hat{A} , mit Erwartungswert

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

\hat{A} kann selbst explizit zeitabhängig sein!

Frage: Zeitabhängigkeit von $\langle \hat{A} \rangle$?

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \langle \dot{\psi}(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{A} | \dot{\psi}(t) \rangle$$

$$\text{mit } |\dot{\psi}(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle$$

benutze die zeitabhängige SG.:

$$i\hbar |\dot{\psi}(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

$$\Leftrightarrow |\dot{\psi}(t)\rangle = \underbrace{\left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H}\right)}_{\hat{B}} |\psi(t)\rangle$$

$$\text{und } \langle \dot{\psi}(t) | = \langle \hat{B}^+ \psi(t) | = -\frac{1}{i\hbar} \langle \hat{H} \psi(t) |$$

Einsetzen:

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \hat{H} \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi(t) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | \hat{A} | \hat{H} \psi(t) \rangle \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | \underbrace{[\hat{H}, \hat{A}]}_{[\hat{H}, \hat{A}]} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi(t) \rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle} \quad \text{Ehrenfest'sches Theorem.}$$

Bemerkungen

(i) Sei speziell $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ und $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$

$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = 0$ Erwartungswert ist zeitlich konstant.

(\hat{A} ist also Erhaltungsgröße, falls $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$).

(ii) Analogie zur klassischen Mechanik:

Sei $A(q, p, t)$ klassische Observable und $H(q, p, t)$ die Hamiltonfkt.

$$\Rightarrow \frac{dA}{dt} = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial A}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial A}{\partial t}$$

f : Zahl der Freiheitsgrade

$$\stackrel{\uparrow}{=} \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial A}{\partial t}$$

Hamiltonsche Dgl. $q_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$, $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$

$$\Rightarrow \frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}$$

Vergleich mit Ehrenfest:

$$\{A, H\} \rightarrow \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}]$$

(iii) Betrachte spezielle konservatives System:

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

es gilt $\Rightarrow [H, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i} \frac{\hat{p}_k}{m}$, $[H, \hat{p}_k] = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x_k}$

Ehrenfest-Theorem für Orte & Impulse

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x}_k \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, \hat{x}_k] \rangle = \frac{\langle \hat{p}_k \rangle}{m} \quad \text{bzw.} \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p}_k \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, \hat{p}_k] \rangle = -\langle \frac{\partial V}{\partial x_k} \rangle \quad \text{bzw.} \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = -\langle \underline{\nabla} V \rangle$$

→ Relationen wie in der klassischen Mechanik!

V. 2: Zeitentwicklungsoperator

Definition:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) \underbrace{|\psi(t_0)\rangle}_{\text{vorgegeben}}$$

↑
Zeitentwicklungsoperator: führt vom Zustand zur Zeit t_0 zum Zustand zur Zeit t .

Frage: Dynamik von \hat{U} ?

benutze die SG

konstant

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) \right] \overbrace{|\psi(t_0)\rangle}^{\text{konstant}}$$
$$\stackrel{!}{=} \hat{H} |\psi(t)\rangle = \left[\hat{H} \hat{U}(t, t_0) \right] |\psi(t_0)\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0)} \quad \text{BVGL für } \hat{U}!$$

Formale Lösung dieser Gleichung:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbb{1} + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \hat{U}(t', t_0)$$

Aufwachen der $\mathbb{1}$ garantiert,

$$\text{dass } \hat{U}(t_0, t_0) = \mathbb{1}, \quad |\psi(t)\rangle|_{t=t_0} = |\psi(t_0)\rangle$$

Vereinfachung für Systeme mit $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$

$$\Rightarrow \boxed{\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot (t - t_0)}}$$

Test:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot (t - t_0)} \cdot \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\right) \cdot i\hbar$$
$$= \hat{U} \hat{H} = \hat{H} \hat{U}$$

da $[\hat{U}, \hat{H}] = 0$, z.z. über Reihenentwicklung.