$\varepsilon_n = \hbar\omega_0 (n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, \ldots$

Nachbemerkung:

Warum gibt es keine Eigenwerte mit nicht-ganzzahligen n ?

„Quantenzahl"

betrachte folgende Fall:

$$\hat{N}\,|\psi\rangle = \underbrace{(n+x)}_{\text{nicht ganzzahlig}}|\psi\rangle \qquad n \in \mathbb{N}, \quad 0 < x < 1$$

es folgt:

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

$$= (-m + n + x)\,\hat{b}^m|\psi\rangle$$

$\Rightarrow$ $\hat{b}^m|\psi\rangle$ ist wieder Eigenzustand!

man sieht hier schon das Problem:

$-m+n+x$ wird negativ,

falls $m \geq n+1$

$\Rightarrow$ Für diesen Zustand hätte $\hat{N}$ einen negativen EW

Widerspruch zur Tatsache, daß die EW von $\hat{N}$ immer positiv sein müssen!

$$\left(\text{wegen } \underbrace{\langle n|\hat{N}|n\rangle}_{n\underbrace{\langle n|n\rangle}_{1}} = \langle n|\hat{b}^{+}\hat{b}|n\rangle = \langle \hat{b}n|\hat{b}n\rangle \geq 0 \Rightarrow n \geq 0 \right)$$

Ortsdarstellung:

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

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

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

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x$$

Konstruktion des Grundzustands

$\hat{b}\underbrace{|0\rangle}_{\substack{\text{Grundzustand}\\ \text{bzw. „Vakuumzustand"}}} = 0$

setze Ortsdarstellung für $\hat{b}$ $\Longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\underbrace{\varphi_0}_{\substack{\text{Wellenfunktion}\\ \text{zu } n=0\text{, d.h.}\\ \text{Grundzustand}}}(\xi) = 0$

$$\Longleftrightarrow \frac{d\varphi_0(\xi)}{d\xi} = -\xi\,\varphi_0(\xi)$$

Lösung der Differentialgleichung:

$$\varphi_0(\xi) = C_0\, e^{-\xi^2/2}$$

C_0: Normierungskonstante

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

$$\boxed{\varphi_0(x) = C_0\, e^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar}x^2}}$$

Grundzustandswellenfunktion ist ein Gaussfunktion

Festlegung von C_0:

$$1 \overset{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \varphi_0^*(x)\, \varphi_0(x) = C_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2}$$

benutze: $$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\Rightarrow \quad 1 \overset{!}{=} C_0^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega_0}} \quad \Longrightarrow \quad C_0 = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

$\Rightarrow$ normierte Grundzustandswellenfunktion

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

Gaussfkt.

reell!

Konstruktion der angeregten Zustände durch Benutzen $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^+)^n |0\rangle$

$$\Rightarrow \quad \varphi_n(\xi) = \frac{C_0}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2}$$

Es ergibt sich:

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

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

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

und $\boxed{H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}}$ Hermitesche Polynome

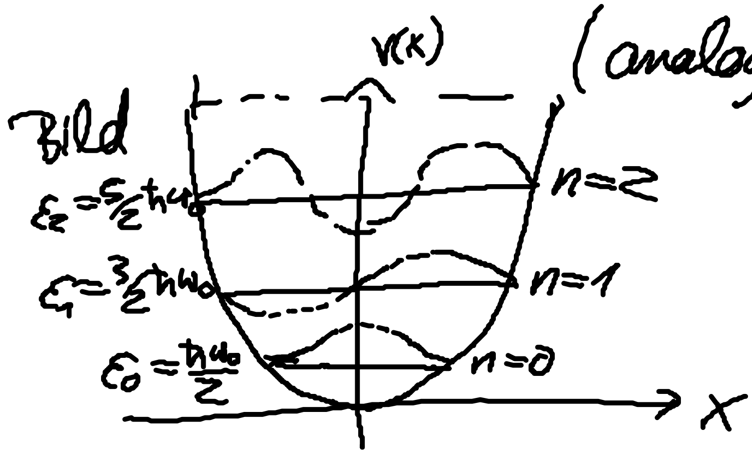
$$H_0(\xi) = 1 \ , \quad H_1(\xi) = 2\xi \ , \quad H_2(\xi) = 2\xi^2 - 2 \quad \ldots$$

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

$$\rightarrow \boxed{\varphi_n(-\xi) = (-1)^n \varphi_n(\xi)}$$

d.h. für n gerade: Wellenfkt. mit gerade Parität

für n ungerade: " " ungerade Parität



(analog zum Kastenpotential

$\varphi_n(x)$ oszillatorisch

<u>Nachbemerkung zur Grundzustandsenergie</u>

$$\varepsilon_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \quad (\text{QM!})$$

- Klassisch kann das System kontinuierlich alle Energien $E \geq 0$ „durchfahren"

$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2$

tiefste Energie: $E = 0$

d.h. $\underbrace{p = 0}_{\text{keine kinetische Energie;}}$, $x = 0$ Teilchen in der Ruhelage

~~Da~~ Dies wäre in der QM auch ein Widerspruch zur Unschärferelation!

$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

sondern endliche Grundzustandsenergie verknüpft mit „Nullpunktsschwingungen"

- QM: $\Delta E = E_{n+1} - E_n$
$= \hbar\omega_0$

Für klassische, makroskop. Systeme ist die Quantisierung nicht spürbar, da $\hbar\omega_0$ zu klein

---

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 Zustände, Observablen und deren Erwartungswerte zu einer Zeit $t > t_0$ machen?

Nehme im folgenden an, daß das System für $t > t_0$ nicht mehr durch andere Messungen gestört wird!

IV.1. Zeitentwicklung von Erwartungswerten
Ehrenfest'sches Theorem

betrachte Observable, dargestellt durch (hermiteschen) Operator $\hat{A}$

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

$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle \underset{\forall t}{=} 1$

lasse hier auch explizite Zeitabhängigkeit von $\hat{A}$ zu!

Frage: Wie entwickelt sich $\langle \hat{A} \rangle$ mit der Zeit?

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

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

benutze zeitabhängige SG (Schrödingergleichung)

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

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

$$\langle \dot{\psi}(t)| = \langle \hat{B}^+ \psi(t)|$$

$$= -\frac{1}{i\hbar} \langle \hat{H} \psi(t)|$$

$$\hat{B}^+ = \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^* \hat{H}^+ = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H}$$

einsetzen in (*)

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle \hat{H}\psi(t)| \hat{A} |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t)| \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} |\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t)| \hat{A} |\hat{H}\psi(t)\rangle$$

---

1. Term: $\langle \hat{H}\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \langle \psi(t)|\hat{H}\hat{A}|\psi(t)\rangle$

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t)| \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H} |\psi(t)\rangle + \langle \psi(t)| \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} |\psi(t)\rangle$$

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle}$$

Ehrenfest'sches Theorem

(Bewegungsgleichung für die Erwartungswerte)

Bemerkungen

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

$$\rightarrow \frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = 0$$

d.h. Erwartungswert ist zeitlich konstant

$\hat{A}$ an sich ist Erhaltungsgröße !

ii) Analogie zur klassischen Mechanik

sei $A(q,p,t)$ klass. Observable

und $H(q,p,t)$ die Hamiltonfunktion

wobei q : Vektor der generalisierten Koordinaten

p : generalisierten Impulse

q, p haben f Komponenten

Zahl der Freiheitsgrade

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

benutze Hamilton'sche BWGL

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad ; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

$$\Rightarrow \frac{dA}{dt} = \underbrace{\sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)}_{\text{Poisson Klammer!}} + \frac{\partial A}{\partial t}$$

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

Vergleiche mit QM:

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H}, \hat{A}]\rangle + \langle\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\rangle$$

im wesentlichen wird beim Übergang zur QM also ersetzt

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

(ii) Betrachte speziell konservatives System

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

es gilt (hier ohne Beweis)

$$[\hat{H}, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i}\frac{\hat{p}_k}{m}$$

$\hat{x}_k$ ist Komponente von $\hat{\underline{r}}$

$$[\hat{H}, \hat{p}_k] = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial x_k}$$

Einsetzen in das Ehrenfest'sche Theorem

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{x}_k \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{x}_k] \rangle + \cancel{\left\langle \frac{\partial \hat{x}_k}{\partial t} \right\rangle}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left\langle \frac{\hbar}{i}\frac{\hat{p}_k}{m} \right\rangle$$

$$= \frac{\langle \hat{p}_k \rangle}{m}$$

bzw: $\frac{d}{dt}\langle \hat{\underline{r}} \rangle = \frac{\langle \hat{\underline{p}} \rangle}{m}$ analog zur klass. Mechanik!

genauso für Impuls

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{p}_k \rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x_k} \right\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\underline{p}} \rangle = \underbrace{-\langle \nabla V \rangle}_{\text{Analog zur konservativen Kraft!}}$$

V.2. Der Zeitentwicklungsoperator

Definition:

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

führt den Zustand bei t_0 in den Zustand bei t über!

<u>Frage</u>: Bewegungsgleichung für $\hat{U}$?

benutze dazu die SG

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle \underset{\substack{\uparrow \\ \text{aus Def. von } \hat{U}}}{=} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0)\overbrace{|\psi(t_0)\rangle}^{\text{konstant}} \overset{!}{=} \hat{H}|\psi(t)\rangle = \hat{H}\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

Kombiniere mittlere und rechte Seite.

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}\hat{U}(t,t_0)}$$

BWG für $\hat{U}$