Wh.: Harmonischer Oszillator

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

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

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

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

Kommutarrelationen:

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

Eigenzustände $\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega_0\,(n + 1/2)|n\rangle$

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

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

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

Frage: Eigenzustände mit nicht-ganzzahligem n?

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

es folgt:

$$\hat{N}\,(\hat{b})^m|\psi\rangle = \left(-m\cdot\hat{b}^m + \hat{b}^m\hat{N}\right)|\psi\rangle$$

$$= (-m+n+x)\left(\hat{b}^m|\psi\rangle\right) \Rightarrow \hat{b}^m|\psi\rangle \text{ ist selbst auch Eigenzustand von } \hat{N}$$

und

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

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

$\neq 0$

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

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

$\rightarrow$ Widerspruch zur Tatsache, dass Eigenwerte von $\hat{N}$ positiv sein müssen.

$$\left(\langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\hat{b}^+\hat{b}|n\rangle = \langle \hat{b}n|\hat{b}n\rangle \geq 0\right)$$

$\Rightarrow$ Es kann keine normierbaren EZ von $\hat{N}$ mit nicht-ganzzahligem Eigenwert geben!

IV. 2 Ortsdarstellung

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

betrachte Wirkung der Leiteroperatoren in Ortsdarstellung:

$$\hat{b}\,\varphi_n(x) = \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}\,\hat{p}\right)\varphi_n(x)$$

$$= \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,x + \frac{\cancel{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}\,\frac{\hbar}{\cancel{i}}\frac{d}{dx}\right)\varphi_n(x) \qquad \text{reell}$$

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:

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

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

$$\Leftrightarrow \frac{d\varphi_0(\xi)}{d\xi} = -\xi\,\varphi_0(\xi) \qquad \text{Lsg.: } \varphi_0 = e^{f(\xi)}$$

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

Normierungskonstante

bzw. $$\varphi_0(x) = c_0\, e^{-\frac{m\omega_0}{2\hbar}x^2}$$ GZ-Wellenfunktion des HOs ist eine Gaußfunktion.

Festlegung von c_0 aus Normierung:

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

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

$\Rightarrow$ 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

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

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

Es ergibt sich:

$$\boxed{\varphi_n(\xi) = \frac{c_0}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}}$$

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

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

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

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

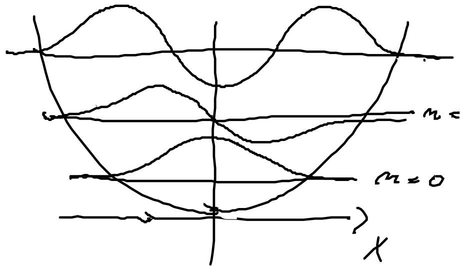
Beachte: $H_n(-\xi) = (-1)^n H_n(\xi)$

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

n gerade $\Rightarrow$ Wellenfunktion mit gerader Parität

n ungerade $\Rightarrow$ " " ungerade "

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



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

$$\lim_{\substack{x\to\infty \\ x\to-\infty}} \varphi_n(x) = 0$$

Nachbemerkung zur Nullpunktsenergie

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

Quantenmechanisch ist $E = 0$ unmöglich.

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

$\Rightarrow x=0\,,\ p=0$ (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 $\langle \hat{A} \rangle$?

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

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

benutze die zeitabhängige SG.:

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

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

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

Einsetzen:

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

$$= -\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi(t)|\underbrace{\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H}}_{[\hat{H},\hat{A}]}|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\Psi(t)\rangle$$

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

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.

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

f: Zahl der Freiheitsgrade

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

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

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

Vergleich mit Ehrenfest:

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

(iii) Betrachte spezielle konservatives System:

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

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

Ehrenfest-Theorem für Orte & Impulse

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

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

$\longrightarrow$ 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

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

$$\stackrel{!}{=} \hat{H} |\Psi(t)\rangle = \left[\hat{H} \hat{U}(t,t_0) \right] |\Psi(t_0)\rangle$$

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

Formale Lösung dieser Gleichung:

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

Auftauchen der $\mathbb{1}$ garantiert,

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

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 $[e^{\hat{A}}, \hat{A}] = 0$, z.z. über Reihendarstellung.