6.3 1D harmonic oscillator revisited: Harmonischer Oszillator in Besetzungszahl-darstellung. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren.

- Was wir schon wissen (Vorlesung Mechanik)

klassische Beschreibung:

Teilchen oszilliert harmonisch $x(t) = A\cos(\omega t + \varphi)$, $\omega^2 = \frac{k}{m}$,

Energie $E = \frac{m}{2}\dot{x}^2 + \frac{k}{2}x^2 = ... = \frac{m}{2}\omega^2 A^2$ zwischen $0 \le E < \infty$, kontinuierlich.

quantenmechanische Beschreibung (Kap. 3):

<u>ohne Rechnung</u>:

→ da Potenzial U(x) zeitunabhängig, folgt $\tilde{\psi}(x,t) = \psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$.

→ da U(x) = U(-x) sind alle WF $\psi(x)$ gerade oder ungerade.

→ da wir das eindimensionale Problem behandeln und $U(x \to \pm\infty) = \infty$, erwarten wir für die untersuchte gebundene Bewegung ein diskretes, nichtentartetes Energiespektrum.

<u>mit Rechnung</u>: In Kap. 3 haben wir mit der Sommerfeld´sche Polynommethode die stationäre Schrödinger-Gleichung in (wie wir jetzt wissen) Ortsdarstellung gelöst, um $\psi(x)$ und E_n aus

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\,\psi(x) = E\,\psi(x)$$

zu bestimmen.

Vorgehensweise:

→ Asymptote abspalten, Potenzreihenansatz für den "Rest", Rekursionsformel

$$\overbrace{\psi(y) = f(y)\, e^{-\frac{y^2}{2}}}^{\uparrow} \quad , \quad \overbrace{f(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k\, y^k}^{\uparrow} \quad , \quad \overbrace{a_{k+2} = \frac{2k+1-\alpha}{(k+1)(k+2)} a_k}^{\uparrow} \, .$$

→ Normierbarkeit sichern

$$\alpha = 2n+1,\; n = 0,1,2,\ldots \text{ sowie } \begin{cases} a_1 = 0, \text{ wenn } n \text{ ungerade} \\ \\ a_0 = 0, \text{ wenn } n \text{ gerade} \end{cases}$$

→ ergibt $E = E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega,\; n = 0,1,2....$ äquidistantes nichtentartetes

Energiespektrum mit den dazugehörigen Eigenzuständen/EF

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right),$$

wobei $H_n(z) := (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}$ die hermiteschen Polynome sind.

Diese sind Lösungen der ODE $\left(\frac{d^2}{dy^2} - 2y \frac{d}{dy} + 2n \right) H_n(y) = 0.$

→ für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte fanden wir

$$\lim_{n\to\infty} \left| \psi_n(x) \right|^2 = w_{kl}(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}, & |x| < A \\ \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} .$$

- **Algebraische Lösung des Eigenwertproblems für den Hamilton-Operator des eindimensionalen harmonischen Oszillators** (Dirac)

$$H(p_x, x) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \xrightarrow{\text{2. Postulat}} \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 \quad \text{mit } \underline{[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar} . \tag{6.15}$$

Dirac führt den Operator $\hat{a}$ und seinen adjungierten $\hat{a}^+$ ein

$$\begin{aligned} \hat{a} &:= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\hat{p}_x \\ \hat{a}^+ &:= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\hat{p}_x \end{aligned} \quad \leftrightarrow \quad \begin{aligned} \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^+ + \hat{a}\right) \\ \hat{p}_x &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}^+ - \hat{a}\right) \end{aligned} \quad . \tag{6.16}$$

Offensichtlich sind <u>weder</u> $\hat{a}$ <u>noch</u> $\hat{a}^+$ <u>selbstadjungiert</u>. Sie genügen der Vertauschungsrelation

$$\underline{\left[\hat{a}, \hat{a}^+\right] = 1, \ \text{bzw. } \hat{a}\hat{a}^+ = 1 + \hat{a}^+\hat{a}} \tag{6.17}$$

denn

$$\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\hat{p}_x , \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\hat{p}_x\right] = -\frac{i}{2\hbar}\underbrace{[\hat{x}, \hat{p}_x]}_{i\hbar} + \frac{i}{2\hbar}\underbrace{[\hat{p}_x, \hat{x}]}_{-i\hbar} = \frac{i}{2\hbar}(-i\hbar + i\hbar) = 1 .$$

Wegen $\quad \hat{a}^+\hat{a} = \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}_x^2 + \frac{i}{2\hbar}\underbrace{\left(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}\right)}_{1/2} = \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}_x^2}{2m}\right) - \frac{1}{2}$ $\quad$ folgt

$$\underline{\hat{H}} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 = \underline{\hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)} . \tag{6.18}$$

Damit ist das Eigenwertproblem (EWP) für den Hamilton-Operator $\hat{H}$ auf das des Operators $\underline{\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}}$ zurückgeführt. Wir bezeichnen die EF des Operators $\hat{N}$ mit $|n\rangle$, die entsprechenden EW mit n und versuchen, die Eigenwertgleichung für $\hat{N}$ zu lösen

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \ , \ \hat{N} = \hat{a}^+\hat{a} . \tag{6.19}$$

- **Eigenwertspektrum des Operators** $\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}$

Zur Berechnung der Eigenwerte von $\hat{N}$ halten wir fest:

(i) Der Operator $\hat{N}$ ist hermitesch, denn $\hat{N}^+ = \left(\hat{a}^+\hat{a}\right)^+ = \hat{a}^+\hat{a}^{++} = \hat{a}^+\hat{a} = \hat{N}$. Also sind die EW n reelle (nicht unbedingt natürliche) Zahlen und die $\{|n\rangle\}$ bilden eine Basis im Hilbert-Raum $\mathcal{H}$.

(ii) Die EW von $\hat{N}$ sind nicht negativ, denn es gilt $n = \langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \langle \hat{a}\,n|\hat{a}\,n\rangle \geq 0$.

Damit ist das Spektrum von $\hat{N}$ nach unten beschränkt.

(iii) Es gilt $\hat{N}\left(\hat{a}|n\rangle\right) = (n-1)\left(\hat{a}|n\rangle\right)$, d.h., wenn $|n\rangle$ EF von $\hat{N}$ zum EW n ist, dann ist $\hat{a}|n\rangle$ ebenfalls EF von $\hat{N}$, allerdings zum EW (n-1).

Beweis:

$$\hat{N}\,\hat{a}|n\rangle = (\hat{a}^+\hat{a})\,\hat{a}|n\rangle \overset{(H3)}{=} (\hat{a}\hat{a}^+ - 1)\,\hat{a}|n\rangle = \hat{a}\,(\hat{a}^+\hat{a} - 1)|n\rangle = \hat{a}\,\hat{N}|n\rangle - \hat{a}|n\rangle =$$

$$\overset{\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle}{=} \hat{a}\,n|n\rangle - \hat{a}|n\rangle = (n-1)\left(\hat{a}|n\rangle\right)$$

Da die EW von $\hat{N}$ (wie die von $\hat{H}$) nicht entartet sind[1)], können sich wegen $\hat{N}|n-1\rangle = (n-1)|n-1\rangle$ (vgl. (H6)) die Zustände $\hat{a}|n\rangle$ und $|n-1\rangle$ nur um eine (Normierungs)Konstante unterscheiden; es muss also $\hat{a}|n\rangle = \text{const}|n-1\rangle$ gelten.

Im Gegensatz zu $|n\rangle$ ist $\hat{a}|n\rangle$ noch nicht normiert. Wir finden

$\langle \hat{a}\,n|\hat{a}\,n\rangle = \langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{N}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n$, und damit schließlich

$$\underline{\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle} \tag{6.20}$$

(iv) Analog wird die Gültigkeit der Relationen

$$\hat{N}\left(\hat{a}^+|n\rangle\right) = (n+1)\left(\hat{a}^+|n\rangle\right), \quad \underline{\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle}\ . \tag{6.21}$$

bewiesen:

$$\hat{N}\,\hat{a}^+|n\rangle = \hat{a}^+(\hat{a}\,\hat{a}^+)|n\rangle \overset{(6.17)}{=} \hat{a}^+(\hat{a}^+\hat{a} + 1)|n\rangle = \hat{a}^+\hat{N}|n\rangle + \hat{a}^+|n\rangle = \hat{a}^+n|n\rangle + \hat{a}^+|n\rangle = (n+1)\left(\hat{a}^+|n\rangle\right).$$

Also ist $\hat{a}^+|n\rangle = \text{const}|n+1\rangle$; Normierung ergibt

$$\left|\hat{a}^+|n\rangle\right|^2 = \langle \hat{a}^+ n|\hat{a}^+ n\rangle = \langle n|\hat{a}\,\hat{a}^+|n\rangle = \langle n|1+\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = (1+n)\langle n|n\rangle = 1+n\,.$$

Zwischenbilanz: Ist $|n\rangle$ EF von $\hat{N}$ zum EW n, dann ist $\hat{a}|n\rangle$ EF von $\hat{N}$ zum EW n - 1 und $\hat{a}^+|n\rangle$ ist EF von $\hat{N}$ zum EW n + 1.

(v) Aus (6.20/21) folgt z.B.

$$(\hat{a}^+)^2|n\rangle = \sqrt{(n+1)(n+2}\;|n+2\rangle \qquad \text{oder} \qquad (\hat{a})^3|n\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)}\;|n-3\rangle \qquad \text{usw.}$$

Bei wiederholter Anwendung von $\hat{a}$ auf $|n\rangle$ könnten im Widerspruch zu **(ii)** negative EW auftreten. Um das zu verhindern, muss ein Grundzustand $\rightarrow$ Vakuumzustand $|n_0\rangle$ mit $\hat{a}|n_0\rangle = 0$ existieren. Wegen

$$\hat{N}|n_0\rangle = \hat{a}^+\hat{a}|n_0\rangle = \hat{a}^+\,0 = 0$$

ist der EW von $\hat{N}$ zum Grundzustand $|n_0\rangle$ gleich Null. Entsprechen der in (H5) verwendeten Notation schreiben wir für den Grundzustand $|0\rangle$ anstelle von $|n_0\rangle$.

Also ist das Spektrum von $\hat{N}$ nach unten beschränkt.

(vi) Nach oben ist das Spektrum von $\hat{N}$ dagegen unbeschränkt.
Zum Beweis nehmen wir das Gegenteil an.
Sei n_{max} der größte EW von $\hat{N}$, d.h. $\hat{a}^+|n_{max}\rangle = 0$. Dann wäre

$$0 = \left|\hat{a}^+|n_{max}\rangle\right|^2 = \langle \hat{a}^+ n_{max}|\hat{a}^+ n_{max}\rangle = \langle n_{max}|\hat{a}\,\hat{a}^+|n_{max}\rangle = \langle n_{max}|(\hat{N}+1)|n_{max}\rangle = n_{max}+1\ ,$$

also n_{max} im Widerspruch zu (ii) negativ.

(vii) Es existieren keine EF $|n\rangle$ von $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ mit EW, die keine natürlichen Zahlen sind.
Beweis: Die Annahme $\hat{N}|n\rangle = (n+x)|n\rangle$, $n \in \aleph$, $0 < x < 1$ führt zum Widerspruch.

Fazit der Eigenschaften (i) – (vii): Die Eigenwerte des Operators $\hat{N}$ sind n = 0, 1, 2, … .

Wegen $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$ (H4), ergibt sich daraus sofort

$$\underline{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2\ldots} \quad , \tag{6.22}$$

also das uns aus Kap. 3 bereits bekannte Energiespektrum des 1D HO mit seine diskreten, äquidistanten, nicht entarteten Energieniveaus.

Wir wollen unsere Ergebnisse ab jetzt folgendermaßen **interpretieren**: Der n-te angeregte Zustand $|n\rangle$ des HO ist mit n Schwingungsquanten der Energie $\hbar\omega$ besetzt.

$\hat{N}$ gemäß $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ $\rightarrow$ Besetzungszahloperator (der Operator zur <u>Observable: Anzahl der Schwingungsquanten</u> in $|n\rangle$)

$\hat{a}$ gemäß $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$ $\rightarrow$ Vernichtungsoperator: Anwendung von $\hat{a}$ auf $|n\rangle$ vernichtet ein Schwingungsquant

$\hat{a}^+$ gemäß $\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$ $\rightarrow$ Erzeugungsoperator: Anwendung … erzeugt … .

Naheliegender Weise nennen wir die

Darstellung zur Basis $\{|n\rangle\}$ $\rightarrow$ Besetzungszahldarstellung der QM.

<u>Bemerkung</u>: Offensichtlich lassen sich die Operatoren von Observablen, die nach dem Korrespondenzprinzip $Q(\underline{p}, \underline{r}) \rightarrow \hat{Q} = Q(\hat{\underline{p}}, \hat{\underline{r}})$ aus den entsprechenden Phasenraumvariablen gebildet werden können, durch die Operatoren $\hat{a}^+$ und $\hat{a}$ ausdrücken. Die Darstellung aller Operatoren von Observablen durch Kombinationen aus Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren wird als zweite Quantisierung bezeichnet und ausführlich im Kurs ThPh V, QM II behandelt. Sie ist von grundlegender Bedeutung für die quantenmechanische Behandlung von Vielteilchensystemen

- **Eigenfunktionen von $\hat{H}$**

$\hat{H}$ und $\hat{N}$ haben gemeinsame EF. Diese lassen sich durch aufeinanderfolgende Anwendung von $\hat{a}^+$ aus dem Grundzustand $|0\rangle$ gewinnen:

$$\hat{a}^+|0\rangle = \sqrt{1}|1\rangle,\ \hat{a}^+|1\rangle \rightarrow |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1}}\hat{a}^+|0\rangle,\ \hat{a}^+|1\rangle = \sqrt{2}|2\rangle,\ \hat{a}^+|1\rangle \rightarrow |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^+|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1\cdot 2}}(\hat{a}^+)^2|0\rangle$$

also

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle,\ n = 0,1,2,... \qquad (6.23)$$

- **EF von $\hat{H}$ in Ortsdarstellung**

Grundzustand: Wir projezieren $\hat{a}|0\rangle = 0$ auf $|x\rangle$ und erhalten

$$0 = \langle x|\hat{a}|0\rangle = \langle x|\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_x|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\underbrace{\langle x|\hat{x}|0\rangle}_{x\langle x|0\rangle = x\psi_0(x)} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\underbrace{\langle x|\hat{p}_x|0\rangle}_{-i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|0\rangle = -i\hbar\frac{d\psi_0(x)}{dx}} =$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\psi_0(x) + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d\psi_0(x)}{dx}$$

Diese ODE für die Grundzustandwellenfunktion lässt sich durch Trennung der Variablen lösen ($\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}\frac{2m\omega}{\hbar}}x\,dx = \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\,dx$). Nach Normierung ergibt sich das bereits in Kap. 3 gefundene Ergebnis

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\ . \qquad (6.24)$$

Einschub: Angeregte Zustände (→ Übungsblatt)

Sukzessive erzeugen wir aus $\psi_0(x)$ die Wellenfunktionen der angeregten Zustände, z.B.

$$\psi_1(x) = \langle x|1\rangle = \langle x|\hat{a}|0\rangle = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\right)\langle x|0\rangle = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\,x\,\psi_0(x) \qquad (6.25)$$

denn mit (*) $\dfrac{d\psi_0}{dx} = -\dfrac{m\omega}{\hbar}\psi_0$ ist $-\sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}}\,x\,\dfrac{d\psi_0}{dx} = \sqrt{\dfrac{m\omega}{2\hbar}}\,x\,\psi_0$.

Bemerkung: Die Substitution $q := \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}\,x$ mit $\dfrac{d}{dx} = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}\dfrac{d}{dq}$ in $\hat{p}_x = -i\hbar\dfrac{d}{dx}$ vereinfacht die Ausdrücke erheblich, denn nun ist

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q + \frac{d}{dq}\right), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q - \frac{d}{dq}\right) \qquad \text{also}$$

$$\psi_n(q) := \langle q|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle q|(\hat{a}^+)^n|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(q - \frac{d}{dq}\right)^n \psi_0(q)\,. \qquad (6.26)$$

Zeigen Sie (Übungsblatt), dass daraus folgt

$$\psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(q)\, e^{-\frac{q^2}{2}}, \quad n = 0,1,2,\ldots$$

wobei $H_n(q) = (-1)^n e^{q^2}\dfrac{d^n}{dq^n}e^{-q^2}$ die Hermite´schen Polynome sind. Die $H_n(q)$ sind Lösungen der linearen homogenen ODE 2. Ordnung $\left(\dfrac{d^2}{dq^2} - 2q\dfrac{d}{dq} + 2n\right)H_n(q) = 0$.

Fazit: Damit ist der Anschluss an die Behandlung des den eindimensionalen harmonischen Oszillator 1D HO nach der Sommerfeld´schen Polynommethode im Kap. 3 vollzogen. Wir haben sein Energiespektrum und seine Eigenfunktionen ausschließlich unter Verwendung der Vertauschungsrelation zwischen Orts- und Impulsoperator $[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar$ bestimmt.

Einschub: Matrixdarstellung der Zustände und Operatoren in Besetzungszahldarstellung (→ Übungsblatt). Bei Verwendung des VONS $\{|n\rangle\}$ aus den EF des Besetzungszahloperators $\hat{N}$

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

als Basis ergibt sich eine besonders einfache Darstellung der Operatoren $\hat{a}$ und $\hat{a}^+$. Aus (6.20) und (6.21) folgt $\langle n|\hat{a}|k\rangle = \sqrt{k}\,\delta_{n,k-1}$ und $\langle n|\hat{a}^+|k\rangle = \sqrt{k+1}\,\delta_{n,k+1}$ also

$$\hat{a} = \left(\langle n|\hat{a}|k\rangle\right) = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \hat{a}^+ = \left(\langle n|\hat{a}^+|k\rangle\right) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Die Matrixdarstellung der Operatoren $\hat{x}, \hat{p}_x$ und $\hat{H}$ erhalten wir aus (6.16)

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^+ + \hat{a}\right) \;\rightarrow\; \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

$$\hat{p}_x = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}^+ - \hat{a}\right) \;\rightarrow\; \hat{p}_x = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

bzw. aus (6.18)

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3/2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 5/2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 7/2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Einschub: Glauber-Zustände

Obwohl $\hat{a}$ und $\hat{a}^+$ als nicht hermitesche Operatoren zu keiner Observablen korrespondieren, sind ihre Eigenfunktionen $|\alpha\rangle$ gemäß

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \ \alpha \in C \text{ komplex}$$

physikalisch relevant.
Die sogenannten quasiklassischen/kohärenten/Glauber-Zustände $|\alpha\rangle$ haben interessante Eigenschaften, von denen einige ohne Beweis aufgeführt seien:

(i) $\langle \Delta x\rangle_{|\alpha\rangle} \langle \Delta p_x\rangle_{|\alpha\rangle} \overset{!}{=} \frac{\hbar}{2}$ $\rightarrow$ "minimale Wellenpakete"

(ii) $\langle x\rangle_{|\alpha\rangle}$ und $\langle p_x\rangle_{|\alpha\rangle}$ genügen den klassischen Bewegungsgleichungen (oszillieren mit Frequenz ω), wohin gegen $\langle x\rangle_{|n\rangle} = \langle p_x\rangle_{|n\rangle} = 0$.

(iii) Für große Werte $|\alpha|$ sind die Unschärfen von $\hat{x}, \hat{p}_x$ und $\hat{H}$ sehr klein.

Vorgehensweise zum Beweis von (i) – (iii) (u.U. als Übungsaufgabe):

1) Zeige, dass $|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$ ein normierter EZ von $\hat{a}$ zum EW α ist.

2) EZ zu verschiedenen EW sind nicht orthogonal, denn $\hat{a}$ ist nicht selbstadjungiert/normal, da $\left[\hat{a}^+, \hat{a}\right] \neq 0$.

3) $\left|\langle \alpha|\beta\rangle\right|^2 = e^{-|\alpha-\beta|^2}$.

■ Ein Fadenpendel mit m = 1 kg, l = 10 cm hat $|\alpha| \cong 10^{15}$.

Kohärente Zustände schlagen die Brücke zur klassischen Physik harmonischer Oszillatoren. Besonders wichtig sind sie in der Quantenoptik.

6.4 Darstellungswechsel. Unitäre Transformationen (UT)

Ausgangspunkt: Die experimentell überprüfbaren Vorhersagen der QM beziehen sich alle auf Skalarprodukte im $\mathcal{H}$ (vgl. Postulate, Kap. 5.5), nämlich auf

$\rightarrow$ qm Erwartungswerte $\langle\psi|\hat{Q}|\psi\rangle$ der Observablen Q bei Messung im Zustand $|\psi\rangle$,

$\rightarrow$ Messwahrscheinlichkeiten Prob $(q = q_n) = |\langle n|\psi\rangle|^2$,

$\rightarrow$ EW von hermiteschen Operatoren $\hat{Q}\,|n\rangle = q_n\,|n\rangle \rightarrow q_n = \langle n|\hat{Q}|n\rangle$.

Die Frage, unter welchen Transformationen bleiben die oben genannten Größen invariant?, lautet anders formuliert:

<u>Welche Transformationen</u> $\hat{U}$ <u>der Kets</u> $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ <u>lassen das Skalarprodukt</u> $\langle\phi|\psi\rangle$ <u>invariant?</u>

Betrachte $|\tilde{\psi}\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$ und $|\tilde{\phi}\rangle = \hat{U}|\phi\rangle$. Dann gilt

$$\langle\tilde{\phi}|\tilde{\psi}\rangle = (\hat{U}|\phi\rangle)^+\,\hat{U}|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{U}^+\hat{U}|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle \quad \text{für alle} \quad |\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}\text{, wenn } \underline{\hat{U}^+\hat{U} = \hat{1}}$$

Offensichtlich ist $\underline{\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}}$ <u>unitärer Operator</u> und es gilt auch $\underline{\hat{U}\,\hat{U}^+ = \hat{1}}$. (6.27)

Die Transformation der Kets $|\phi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (der Übergang zwischen zwei VONS $\rightarrow$ Darstellungswechsel), die Skalarprodukte $\langle\phi|\psi\rangle$ invariant lässt, wird durch eine unitäre Matrix $\hat{U}$ vermittelt: Betrachte die VONS $\{|n\rangle\}$ und $\{|k\rangle\}$ und entwickle $|n\rangle$ nach $\{|k\rangle\}$

$$|n\rangle = \sum_k \langle k|n\rangle\,|k\rangle = \sum_k U_{kn}\,|k\rangle \quad \text{mit} \quad U_{kn} := \langle k|n\rangle .$$

Die so definierte Matrix $\underline{\underline{U}}$ ist unitär.

Beweis: $\delta_{n'n} = \langle n'|n\rangle = \sum_{k,k'} U^*_{k'n'}\langle k'||k\rangle U_{kn} = \sum_k U^*_{kn'}\,U_{kn} = \sum_k U^+_{n'k}\,U_{kn}$ also $\underline{\underline{1}} = \underline{\underline{U}}^+\underline{\underline{U}}$.

- **Transformation eines Operators**

Der hermitesche Operator $\hat{Q}$ besitze die EF $\{|n\rangle\}$ mit dazugehörigen EW q_n. In der Basis seiner EF wird $\hat{Q}$ durch eine diagonale Matrix dargestellt

$$\hat{Q} \leftrightarrow \left(\langle n'|\hat{Q}|n\rangle\right) = (q_n\, \delta_{n'n}) \quad \rightarrow \text{Eigendarstellung} .$$

In einer anderen Basis, $\{|k\rangle\}$, ist die Matrixdarstellung von $\hat{Q}$ i.a. nicht diagonal

$$\hat{Q} \leftrightarrow \left(\langle n'|\hat{Q}|n\rangle\right) = \left(\sum_{k\,k'} U^*_{k'n'} \langle k'|\hat{Q}|k\rangle U_{k\,n}\right) = \left(\sum_{k\,k'} U^*_{k'n'}\, \tilde{Q}_{k'k}\, U_{k\,n}\right) = \left(\sum_{k\,k'} U^+_{n'k'}\, \tilde{Q}_{k'k}\, U_{k\,n}\right) \leftrightarrow \underline{\underline{U}}^+\, \underline{\underline{\tilde{Q}}}\, \underline{\underline{U}}$$

<u>Fazit</u>: Die (hermitesche) Matrix zum (hermiteschen) Operator $\hat{Q}$ kann durch eine unitäre Transformation $\underline{\underline{U}}$ diagonalisiert werden.

Aus $\hat{Q} = \hat{U}^+ \tilde{\hat{Q}}\, \hat{U}$ folgt mit (6.27) $\tilde{\hat{Q}} = \hat{U}\, \hat{Q} \hat{U}^+$. (6.28)

Fazit: Bei Basiswechsel in $\mathcal{H}$ gilt

Ket $|\psi\rangle \rightarrow |\tilde{\psi}\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$,

Bra $\langle\psi| \rightarrow \langle\tilde{\psi}| = \langle\psi|\hat{U}^+$,

Operator $\hat{Q} \rightarrow \tilde{\hat{Q}} = \hat{U}\hat{Q}\hat{U}^+$,

$\langle\tilde{\phi}|\tilde{\psi}\rangle = (\hat{U}|\phi\rangle)^+\, \hat{U}|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{U}^+\hat{U}|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle$

Zustandsvektoren und Operatoren ändern sich, aber die Skalarprodukte bleiben invariant.

<u>Beachte</u>: Für die Transformation des Kommutators $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ bei Basiswechsel gilt

$$\left[\tilde{\hat{A}},\tilde{\hat{B}}\right] = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^+\hat{U}\hat{B}\hat{U}^+ - \hat{U}\hat{B}\hat{U}^+\hat{U}\hat{A}\hat{U}^+ = \hat{U}(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\hat{U}^+ = \widetilde{\left[\hat{A},\hat{B}\right]} \qquad (6.29)$$

Ob zwei Operatoren vertauschbar sind oder nicht, ist unabhängig von ihrer Darstellung.

Weitere Eigenschaften unitärer Operatoren ($\rightarrow$ Übung)

(i) EW unitärer Operatoren können nur komplexe Zahlen vom Betrag Eins sein.

(ii) $\left(\tilde{\hat{Q}}\right)^{+} = \left(\tilde{\hat{Q}}^{+}\right)$ $\rightarrow$ der adjungierte des transformierten Operators und der transformierte des adjungierten Operators stimmen überein. Mit anderen Worten: Die unitäre Transformation und die Adjungation eines Operators sind vertauschbar.

(iii) Ist $\hat{Q} = \hat{Q}^{+}$ hermitesch, dann ist $\hat{U} = e^{i\lambda\hat{Q}}$ unitär, vorausgesetzt $\lambda = \lambda^{*}$ ist reell, denn $\hat{U}^{+} = e^{-i\lambda^{*}\hat{Q}} = e^{-i\lambda\hat{Q}}$ also $\hat{U}^{+}\hat{U} = \hat{1}$. Beispiel: Der Zeittranslationsoperator $\hat{T}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\,t\right)$, bei dem die Zeit die Rolle des Parameters λ übernimmt.

6.5 Dynamik von Quantensystemen. Heisenberg-Bild. Integrale der Bewegung

Bisher: Zeitentwicklung des qm Zustands ist durch Zeitabhängigkeit des Zustandsvektors $|\psi(t)\rangle$ gemäß SG $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$ gegeben.

Wir definieren den Zeitentwicklungsoperator (ZEO) $\hat{U}(t,t_0)$ über

$$\text{Def.: } |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle, \quad \hat{U}(t_0,t_0) = \hat{1}. \tag{6.30}$$

Dieser Operator muss unitär sein, damit die Normierung erhalten bleibt:

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|\hat{U}^{+}(t,t_0)\,\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad \text{wenn} \quad \hat{U}^{+}(t,t_0) = \hat{U}^{-1}(t,t_0)\,.$$

Der ZEO ist Lösung der Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}\,\hat{U}(t,t_0), \quad \hat{U}(t_0,t_0) = \hat{1}. \tag{6.31}$$

- **Heisenberg-Bild**

Def.: $|\psi_H\rangle := \hat{U}^+(t,t_0)|\psi(t)\rangle$ (6.23)

$|\psi_H\rangle$ ist ein konstanter, zeitunabhängiger Zustandsvektor, denn

$$|\psi_H\rangle := \hat{U}^+(t,t_0)|\psi(t)\rangle = \hat{U}^+(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle = |\psi(t_0)\rangle$$

Rücktransformation: $|\psi(t)\rangle := \hat{U}(t,t_0)|\psi_H\rangle$. Die Transformation der Operatoren in das Heisenberg-Bild erfolgt gemäß der Regeln für unitäre Transformationen, also

$$\hat{Q}_H(t) = \hat{U}^+(t,t_0)\,\hat{Q}(t)\,\hat{U}(t,t_0) \qquad \text{bzw.} \qquad \hat{Q}(t) = \hat{U}(t,t_0)\,\hat{Q}_H(t)\,\hat{U}^+(t,t_0)\,. \tag{6.33}$$

Für die vollständige Ableitung eines Operators $\hat{Q}_H(t)$ nach der Zeit finden wir aus (6.33)

$$\frac{d}{dt}\hat{Q}_H(t) = \frac{\partial \hat{U}^+}{\partial t}\hat{Q}\,\hat{U} + \hat{U}^+\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t}\hat{U} + \hat{U}^+\hat{Q}\frac{\partial \hat{U}}{\partial t}\ .$$

Daraus ergibt sich unter Verwendung von $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U} = \hat{H}\,\hat{U}$ bzw. $-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^+ = \hat{U}^+\hat{H}$ aus (6.31)

$$\frac{d}{dt}\hat{Q}_H(t) = \left(\frac{1}{-i\hbar}\hat{U}^+\hat{H}\right)\hat{Q}\,\hat{U} + \hat{U}^+\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t}\hat{U} + \hat{U}^+\hat{Q}\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\,\hat{U}\right) = \frac{1}{i\hbar}\underbrace{\hat{U}^+(\hat{Q}\,\hat{H} - \hat{H}\hat{Q})\,\hat{U}}_{[\hat{Q},\hat{H}]_H = [\hat{Q}_H,\hat{H}_H]} + \underbrace{\hat{U}^+\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t}\hat{U}}_{\text{Def.:}\frac{\partial \hat{Q}_H}{\partial t}}\,,$$

die Bewegungsgleichung der Operatoren im Heisenberg-Bild

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{Q}_H(t) = \left[\hat{Q}_H,\hat{H}_H\right] + i\hbar\frac{\partial \hat{Q}_H}{\partial t} \tag{6.34}$$

Fazit: Im Heisenberg-Bild sind die Zustandvektoren zeitunabhängig. Die Operatoren sind dagegen zeitabhängig, auch wenn der entsprechende Operator im Schrödinger-Bild nicht explizit von der Zeit abhängt. Fazit: Im Heisenberg-Bild ist die zeitliche Entwicklung des quantenmechanischen Systems vollständig in den Bewegungsgleichungen der Operatoren enthalten.

Beachte die formale Ähnlichkeit von (6.34) mit

$$\frac{d}{dt}Q(\underline{p},\underline{q},t)=\sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial Q}{\partial q_i}\frac{dq_i}{dt}+\frac{\partial Q}{\partial p_i}\frac{dp_i}{dt}\right)+\frac{\partial Q}{\partial t}=\sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial Q}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial Q}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)+\frac{\partial Q}{\partial t}=\{Q,H\}+\frac{\partial Q}{\partial t},$$

die die zeitliche Änderung einer klassischen Phasenraumvariablen beschreibt. Daraus ergibt sich die bereits im Skript Mechanik im Zusammenhang mit der Algebra der Poisson-Klammern diskutierte Korrespondenz $\underline{\{Q,H\} \leftrightarrow \frac{i}{\hbar}[\hat{Q},\hat{H}]}$.

- Erhaltungsgrößen. Integrale der Bewegung

Def.: Die Observable Q heißt Integral der Bewegung, wenn Q nicht explizit von der Zeit abhängt und $\hat{Q}$ mit dem Hamilton-Operator des betrachteten quantenmechanischen Systems vertauschbar ist.

Der quantenmechanische Erwartungswert eines Integrals der Bewegung Q ist für beliebige $|\psi(t)\rangle$ zeitlich konstant, $\frac{d}{dt}\langle\hat{Q}\rangle=0$.

In der QM hat auch eine Erhaltungsgröße i.a. keinen scharfen Wert. Eine Messung liefert ein bestimmtes q_n mit der Messwahrscheinlichkeit $\text{Prob}(q=q_n)=|\langle\psi_n|\psi(t)\rangle|^2=|c_n(t)|^2$, die im Fall eines Integrals der Bewegung nicht von der Zeit abhängt.

Zeigen!

- **Konservative Systeme**

In diesem Fall ist $\hat{H}$ zeitunabhängig und die Lösung von (6.31) lautet $\hat{U}(t,t_0)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$.

$\hat{H}$ und $\hat{U}$ sind also miteinander vertauschbar. Die Operatoren anderer Observabler sind im allgemeinen zeitabhängig, $\hat{Q}_H(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\hat{Q}(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$, bis auf diejenigen, die mit $\hat{H}$ kommutieren.

Einschub: Zusammenfassung Hilbert-Raum

Zustandsvektor: $|\psi\rangle$

Basis: $\{|n\rangle\}$, diskret oder kontinuierlich, z.B. EF von $\hat{Q} = \hat{Q}^+$

Orthonormierung:
$$\langle n | n' \rangle = \begin{cases} \delta_{nn'} & \rightarrow \text{ diskrete Basis} \\ \delta(n - n') & \rightarrow \text{ kontinuierliche Basis} \end{cases}$$

Vollständigkeit:
$$\begin{cases} \sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1} \\ \int dn\ |n\rangle\langle n| = \hat{1} \end{cases}$$

Entwicklungssatz/Superposition:
$$|\psi\rangle = \begin{cases} \sum_{n=1}^{\infty} c_n\ |n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle n|\psi\rangle\ |n\rangle, \text{ also } c_n := \langle n|\psi\rangle \\ \int dn\ \langle n|\psi\rangle\ |n\rangle \end{cases}$$

Darstellung zur Basis $\{|n\rangle\}$:
$$|\psi\rangle \leftrightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1|\psi\rangle \\ \langle 2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle n|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad \text{(Spaltenvektor)}$$

$$\langle\psi| = |\psi\rangle^+ \leftrightarrow (c_1^*, c_2^*, \ldots c_n^*, \cdots) = \left(\langle\psi|1\rangle, \langle\psi|2\rangle, \ldots \langle\psi|n\rangle, \cdots\right)$$

Skalarprodukt: $\langle\phi|\cdot|\psi\rangle := \langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$

linearer Operator: $|\psi'\rangle = \hat{Q}|\psi\rangle = |\hat{Q}\psi\rangle$, $\quad \langle\hat{Q}\psi| = |\hat{Q}\psi\rangle^+ = \langle\psi|\hat{Q}^+$

hermitescher Operator: $\hat{Q} = \hat{Q}^+$

Matrixdarstellung zur Basis $\{|n\rangle\}$:
$$\hat{Q} \leftrightarrow \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & \cdots & Q_{1j} & \cdots \\ Q_{21} & Q_{22} & \cdots & Q_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ Q_{i1} & Q_{i2} & & Q_{ij} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix}, \quad Q_{ij} := \langle n_i|\hat{Q}|n_j\rangle$$

Basiswechsel: $|\tilde{\psi}\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$, $\langle\tilde{\psi}| = \langle\psi|\hat{U}^+$, $\tilde{\hat{Q}} = \hat{U}\hat{Q}\hat{U}^+$, $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$

Skalarprodukt $\langle\phi|\psi\rangle$ bei Basiswechsel invariant