

$$\epsilon_n = \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Nachkommeling:

Warum gibt es keine Eigenwert mit nicht-ganzzahligen n ?

↑ „Quantenzahl“

betrachte folgende Fall:

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

es folgt:

$$\begin{aligned} \hat{N} (\hat{b}^m |\psi\rangle) &= (-m \hat{b}^m + \hat{b}^m \hat{N}) |\psi\rangle \\ &\stackrel{\uparrow}{=} \underbrace{[\hat{b}^m, \hat{N}] = -m \hat{b}^m}_{\text{}} = (-m+n+x) \hat{b}^m |\psi\rangle \end{aligned}$$

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

man sieht hier schon das Problem:

$-m+n+x$ wird negativ,
falls $m \geq n+1$

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

Widerspruch zu Torkado, dass die EW von \hat{N} immer positiv sein müssen!

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

Ansatzdarstellung:

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

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

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

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

Konstruktion des Grundzustands

$$\hat{b} |0\rangle = 0$$

Grundzustand
bzw. "Vakuumzustand"

Wellenfkt.
zu $n=0$, d.h.
Grundzustand

setze Ansatzdarstellung für $\hat{b} \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\xi}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \varphi_0(\xi) = 0$

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

Lösung der Differentialgleichung:

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

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

Normierungskonstant

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

Grundzustandswellenfunktion ist ein Gaussfunktion

Bestimmung von C_0 :

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

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

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

\Rightarrow normierte Grundzustandswellenfunktion

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

Gaussfkt.
reell!

Konstruktion der angeregten Zustände durch

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

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

es ergibt sich:

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

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

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

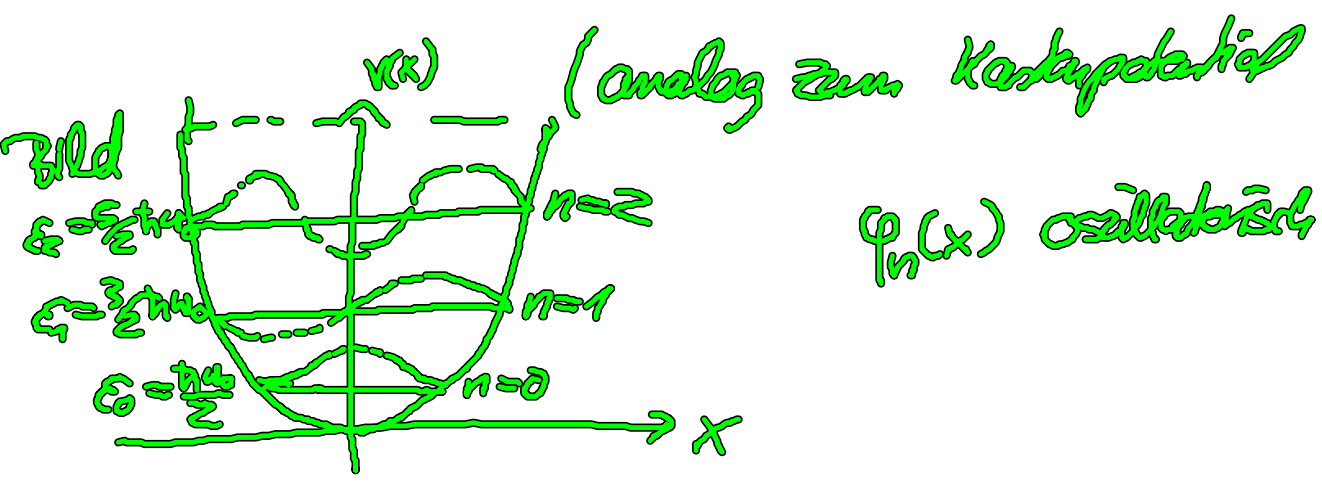
und $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$ Hermite'sche
Polynome

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

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

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

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



Nachbemerkung zur Grundzustandsenergie

$$E_0 = \frac{h\nu}{2} \quad (\text{QM!})$$

• Klassisch kann das System kontinuierlich alle Energien $E \geq 0$ „durchfahren“

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

kleinste Energie: $E=0$

d.h. $p=0$, $x=0$
 kleinste Energie; Talchen in der Ruhelage

Das Ding wäre in der QM auch ein Widerspruch zur Unschärferelation!
 $\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{2}$

Sondern endliche Grundzustandsenergie
verknüpft mit „Nullpunktschwingungen“

• 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 Erwartungswert
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!

V.1. Zeitentwicklung von Erwartungswerten Ehrenfest'sches Theorem

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

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

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

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

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

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

(*)

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

benutze zeitabhängige SG (Schrödinger-Gleichung)

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

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

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

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

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

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

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

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

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 zum klassischen Mechanik

Sei $A(q, p, t)$ klass. Observabl.

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

wobei q : Vektor der generalisierten
Koordinaten

p : generalisierte 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 Hamiltonsche BUNGL

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

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

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

Vergleiche mit QM.

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

im wesentlichen wird beim Übergang zu QM also ersetzt

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

(ii) Betrachte speziell konservatives System

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

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{r}

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

Einsetzen in das Ehrenfest'sche Theorem

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{x}_n \rangle &= \frac{1}{\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{x}_n] \rangle + \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \hat{x}_n}{\partial t} \rangle \\ &= \frac{\langle \hat{p}_n \rangle}{m} \end{aligned}$$

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

genauso für Impuls

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p}_n \rangle = - \langle \frac{\partial V}{\partial x_n} \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = - \langle \nabla V \rangle$$

Analog zur konservativen Kraft!

V.2. Der Zeitentwicklungsoperator

Definition:

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

Zeitentwicklungsoperator

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

Frage: Bewegungsgleichung für \hat{U} ?

benutze dazu die SG

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

↑
aus Def. von \hat{U}

Kombiniere mittlere und rechte Seite.

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

BWZ für \hat{U}