Nachtrag: Erwartungswerte von Ort und Impuls eines

1D Teilchen im Zustand $|\psi\rangle$ → Ortswellenfkt. $\psi(x) = \langle \varphi_x | \psi \rangle$

Impulswellenfkt. $\tilde{\psi}(p) = \langle \tilde{\varphi}_p | \psi \rangle$

• $$\langle x \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | x | \psi \rangle = \langle \psi | x \overset{\int dx' |\varphi_{x'}\rangle\langle\varphi_{x'}|}{\overset{\|}{\mathbb{1}}} | \psi \rangle = \int dx' \, \langle \psi | \underbrace{\hat{x} | \varphi_{x'} \rangle}_{= x' |\varphi_{x'}\rangle} \langle \varphi_{x'} | \psi \rangle$$

$$= \int dx' \, x' \underbrace{\langle \psi | \varphi_{x'} \rangle}_{\psi(x)^*} \underbrace{\langle \varphi_{x'} | \psi \rangle}_{= \psi(x)}$$

$$= \int dx \; x \underbrace{|\psi(x)|^2}_{= \rho(x)}$$

$\rho(x)$: Aufenthaltswhk. dichte am Ort x

• $$\langle p \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | p | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbb{1} \, p | \psi \rangle = \int dx \underbrace{\langle \psi | \varphi_x \rangle}_{= \psi(x)^*} \underbrace{\langle \varphi_x | p | \psi \rangle}_{= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)}$$

$$= \int dx \; \psi(x)^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right) \qquad (*)$$

alternativ: • $$\langle p \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | p \underset{\int \frac{dp'}{2\pi\hbar} |\tilde{\varphi}_{p'}\rangle\langle\tilde{\varphi}_{p'}|}{\underset{\|}{\mathbb{1}}} | \psi \rangle = \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} \langle \psi | \underbrace{\hat{p} | \tilde{\varphi}_{p'} \rangle}_{= p' |\tilde{\varphi}_{p'}\rangle} \langle \tilde{\varphi}_{p'} | \psi \rangle$$

$$= \int \frac{dp'}{2\pi\hbar} \, p' \underbrace{\langle \psi | \tilde{\varphi}_{p'} \rangle}_{\tilde{\psi}(p')^*} \underbrace{\langle \tilde{\varphi}_{p'} | \psi \rangle}_{\tilde{\psi}(p')} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \, p \, |\tilde{\psi}(p)|^2$$

• $$\langle x \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | \underset{\int \frac{dp}{2\pi\hbar} |\tilde{\varphi}_p\rangle\langle\tilde{\varphi}_p|}{\underset{\|}{\mathbb{1}}} x | \psi \rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \langle \psi | \tilde{\varphi}_p \rangle \langle \tilde{\varphi}_p | x | \psi \rangle$$

Nebenrechnung: $$\langle \tilde{\varphi}_p | x | \psi \rangle = \int dx \, e^{-i\frac{px}{\hbar}} \, x \, \psi(x) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \overbrace{\int dx \, e^{-i\frac{px}{\hbar}} \psi(x)}^{= \langle \tilde{\varphi}_p | \psi \rangle}$$

Ortsop. X in Impulsdarstellung → $$= \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial p}} \tilde{\psi}(p)$$

→

$$\langle x \rangle_{|\psi\rangle} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \, \tilde{\psi}^*(p) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\psi}(p) \right)$$

(analog zu (*))

Harmonischer Oszillator

z.B. Teilchen der Masse m im Pot. $u(x) = \frac{1}{2} k x^2$

$$\rightarrow \quad \boxed{H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2}$$ wobei $\omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}$

klassisch: harmonische Schwingung der Frequenz ω

quantenmechanisch: harm. Oszillator besitzt

diskrete Eigenenergien $\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)}$ (I)

$n = 0, 1, 2, 3, \ldots$

zu Energieeigenfunktionen $\psi_n(x)$ gegeben durch

Grundzustandsfunktion:

$$\boxed{\psi_0(x) = (\pi \ell^2)^{-1/4} \, e^{-x^2/2\ell^2}} \quad \text{(II)}$$

mit Oszillatorlänge $\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

und Rekursionsrelation

$$\boxed{\psi_{n+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{2n+2}} \left(\frac{x}{\ell} - \ell \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_n(x)} \quad \text{(III)}$$

Bemerkungen

1) q. m. harm. Oszillator relevant für quantenmech. Beschreibung harmonisch schwingender Systeme

→ Gitterschwingungen, el.-mag. Feld, ...
↳ Phononen ↳ Photonen

2) $E_n - \frac{\hbar\omega}{2} = n\hbar\omega = nh\nu \,\hat{=}$ Plancks Quanten hypothese

3) Grundzustandsenergie $\frac{\hbar\omega}{2}$ = Nullpunktsenergie

physikalische Relevanz ?

Wir zeigen (I), (II) und (III) mittels Operator-Methode (Dirac, Born, ...) :

Ausgangspunkt : verwende statt Operatoren x und p neue Operatoren b und b^+ def. durch

$$\boxed{\begin{aligned} b &:= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\ell} + \frac{i\ell}{\hbar}p\right) \\ &\text{herm. Ad.} \\ b^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\ell} - \frac{i\ell}{\hbar}p\right) \end{aligned}} \qquad \left(\ell = \sqrt{\hbar/m\omega}\right)$$

(im wesentlichen also „$b = x + ip$" und „$b^+ = x - ip$")

$$\rightarrow \left.\begin{aligned} x &= \frac{\ell}{\sqrt{2}}\left(b^+ + b\right) \\ p &= \frac{i\hbar}{\ell\sqrt{2}}\left(b^+ - b\right) \end{aligned}\right\} \quad (1)$$

fundamental für alles folgende ist der Kommutator von b und $b^\dagger$,

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

⌈ folgt aus $[x, p] = i\hbar \mathbb{1}$ und einfacher Rechnung:

$$[b, b^+] = \frac{1}{2}\left[\frac{x}{\ell} + \frac{i\ell}{\hbar}p, \frac{x}{\ell} - \frac{i\ell p}{\hbar}\right] = \frac{i}{2\hbar}\Big(\underbrace{[p, x]}_{=-i\hbar\mathbb{1}} - \underbrace{[x, p]}_{=+i\hbar\mathbb{1}}\Big) = \mathbb{1} \quad ⌋$$

und die Darstellung von H in b und $b^\dagger$:

$$\boxed{H = \hbar\omega\left(b^+b + \tfrac{1}{2}\right)} \ .$$

⌈ mittels (1):

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2} = \underbrace{-\frac{1}{4m}\frac{\hbar^2}{\ell^2}}_{=\frac{\hbar\omega}{4}}(b^+ - b)^2 + \underbrace{\frac{m\omega^2\ell^2}{4}}_{=\frac{\hbar\omega}{4}}(b^+ + b)^2$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}\Big(b^+b + \underbrace{b\,b^+}_{=b^+b + [b, b^+] = b^+b + 1}\Big) = \hbar\omega\left(b^\dagger b + \tfrac{1}{2}\right) \ . \quad ⌋$$

bleibt zu zeigen: $N := b^+ b$ besitzt Eigenwerte $0, 1, 2, \ldots$ und Eigenzustände gemäß (II) und (III)!

(i) Eigenwerte von N sind nicht negativ!

⌈ ist λ EW von N zu normierten EZ $|\psi_\lambda\rangle$, so gilt:

Positivität des S.P.

$$\lambda = \langle\psi_\lambda, \lambda\psi_\lambda\rangle = \langle\psi_\lambda, N\psi_\lambda\rangle = \langle\psi_\lambda, b^+ b\,\psi_\lambda\rangle = \langle b\psi_\lambda, b\psi_\lambda\rangle \geq 0 \quad ⌋$$

(ii) λ sei EW von N zum norm. EZ $|\psi_\lambda\rangle$; dann gilt:

a) $b^+|\psi_\lambda\rangle$ ist EZ zum EW $\lambda+1$ und
$\| b^+|\psi_\lambda\rangle \| = \sqrt{\lambda+1}$

b) falls $\lambda > 0$: $b|\psi_\lambda\rangle$ ist EZ zum EW $\lambda - 1$
und $\| b|\psi_\lambda\rangle \| = \sqrt{\lambda}$;
Falls $\lambda = 0$: $b|\psi_\lambda\rangle = 0$

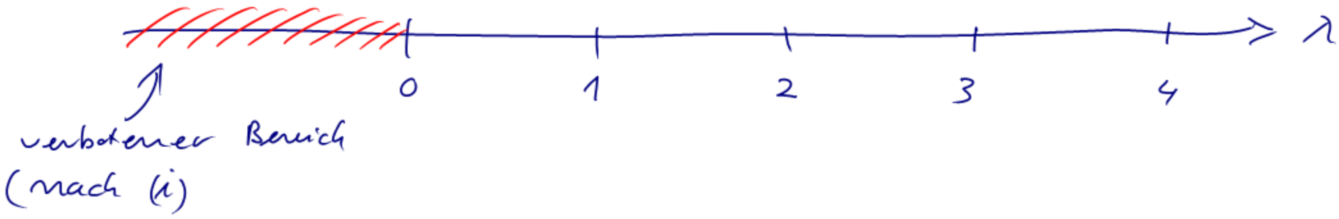
⌜ Beweis: s.u. ⌟

(iii) es gibt keinen EW in $]0,1[$!

⌜ gäbe es $\tilde{\lambda} \in]0,1[$ so gäbe es nach (ii) b) auch einen EW $\tilde{\lambda} - 1 < 0$; im Widerspruch zu (i) ⌟

aus (i), (ii) und (iii) ergibt sich somit folgendes Bild:

$$0 \xleftarrow{b} |\psi_0\rangle \underset{b}{\overset{b^+}{\rightleftarrows}} |\psi_1\rangle \underset{b}{\overset{b^+}{\rightleftarrows}} |\psi_2\rangle \underset{b}{\overset{b^+}{\rightleftarrows}} |\psi_3\rangle \underset{b}{\overset{b^+}{\rightleftarrows}} |\psi_4\rangle$$



d.h. die EWe von N sind ganzzahlig und nicht negativ,
also $\lambda = 0, 1, 2, 3, \ldots$ ■

insbes. nach (ii):

- $|\psi_n\rangle \longrightarrow |\psi_{n+1}\rangle$ mittels „Aufsteiger" b^+
gemäß $|\psi_{n+1}\rangle = \dfrac{b^+}{\sqrt{n+1}} |\psi_n\rangle$

- $|\psi_n\rangle \longrightarrow |\psi_{n-1}\rangle$ (oder 0, wenn $n=0$)
  mittels „Absteiger" b gemäß $|\psi_{n-1}\rangle = \frac{b}{\sqrt{n}}|\psi_n\rangle$

zu (ii):

$$[AB, C] = A[B,C] + [A,C]B$$

$$(*)\quad [N, b] = [b^+ b, b] = b^+\underbrace{[b,b]}_{=0} + \underbrace{[b^+,b]}_{=-1} b = -b$$

$$(**)\quad [N, b^+] = [b^+ b, b^+] = b^+\underbrace{[b,b^+]}_{=1} + \underbrace{[b^+,b^+]}_{=0} b = +b^+$$

- $|\psi_\lambda\rangle$ sei $\overset{\text{norm.}}{\text{EZ}}$ zum EW λ, dann

$$N\, b^+|\psi_\lambda\rangle = (b^+ N + [N, b^+])|\psi_\lambda\rangle \overset{(**)}{=} (b^+ N + b^+)|\psi_\lambda\rangle$$

$$= (\lambda+1)\, b^+|\psi_\lambda\rangle\text{; d.h. } b^+|\psi_\lambda\rangle \text{ EZ zum EW } \lambda+1,$$

$$\| b^+|\psi_\lambda\rangle\|^2 = \langle b^+\psi_\lambda, b^+\psi_\lambda\rangle = \langle \psi_\lambda, b b^+ \psi_\lambda\rangle = \langle\psi_\lambda, (\underbrace{b^+ b}_{=N} + \underbrace{[b,b^+]}_{=1})\psi_\lambda\rangle$$

$$= \lambda + 1, \quad \text{d.h. } \|b^+|\psi_\lambda\rangle\| = \sqrt{\lambda+1}$$

analog für $b|\psi_\lambda\rangle$:

$$N\, b|\psi_\lambda\rangle = (bN + [N,b])|\psi_\lambda\rangle \overset{(*)}{=} (bN - b)|\psi_\lambda\rangle$$

$$= (b\lambda - b)|\psi_\lambda\rangle = (\lambda-1)\, b|\psi_\lambda\rangle\text{; d.h. } b|\psi_\lambda\rangle \text{ ist EZ zum EW } \lambda-1;$$

(solange $b|\psi_\lambda\rangle \neq 0_{\mathcal{H}}$)

$$\| b|\psi_\lambda\rangle\|^2 = \langle b\psi_\lambda, b\psi_\lambda\rangle = \langle\psi_\lambda, \underbrace{b^+ b}_{=N}\psi_\lambda\rangle = \lambda\text{; d.h. } \|b|\psi_\lambda\rangle\| = \sqrt{\lambda};$$

insbes. $b|\psi_\lambda\rangle = 0_{\mathcal{H}}$ falls $\lambda = 0$.

Bestimmung der Eigenfunktionen:

- $0_{\mathcal{H}} \overset{!}{=} b|\psi_0\rangle$ bedeutet in Ortsdarstellung

$$0 \overset{!}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{x}{\ell} + \frac{i\ell}{\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\right)\psi_0(x)$$

d.h. $$\boxed{0 = \left(x + \ell^2 \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_0(x)}$$

die durch diese DGL eindeutig bestimmte <u>normierte</u> Grundzustandswellenfunktion lautet demnach offenbar

$$\psi_0(x) = (\pi \ell^2)^{-1/4} \, e^{-x^2/2\ell^2} .$$

- $|\psi_{n+1}\rangle \overset{!}{=} \frac{1}{\sqrt{n+1}} b^{+} |\psi_n\rangle$ lautet in Ortsdarstellung

$$\psi_{n+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\ell} - \frac{i\ell}{\hbar} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \right) \psi_n(x)$$

d.h. $$\psi_{n+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{2n+2}} \left(\frac{x}{\ell} - \ell \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi_n(x)$$