Wir definieren nun noch $\boxed{\hat{N} = \hat{a}^{+}\hat{a}}$, den Anzahloperator, $\hat{N}^{+} = \hat{N}$ (Ü8.2.5)

$\Rightarrow$ $\boxed{\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{1})}$ Offensichtlich sind Eigenzustände von $\hat{N}$ auch Eigenzustände von $\hat{H}$ und umgekehrt.

* Vertauschungsrelationen von $\hat{N}$ mit $\hat{a}$ und $\hat{a}^{+}$:

– benutze daß $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} \pm \hat{A}\hat{C}\hat{B}$
$= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$

$\Rightarrow$

- $\boxed{[\hat{N}, \hat{a}] = [\underset{A}{\hat{a}^{+}}\underset{B}{\hat{a}}, \underset{C}{\hat{a}}] = \hat{a}^{+}\underbrace{[\hat{a}, \hat{a}]}_{0} + \underbrace{[\hat{a}^{+}, \hat{a}]}_{-1}\hat{a} = -\hat{a}} = \hat{N}\hat{a} - \hat{a}\hat{N}$

- $\boxed{[\hat{N}, \hat{a}^{+}] = [\underset{A}{\hat{a}^{+}}\underset{B}{\hat{a}}, \underset{C}{\hat{a}^{+}}] = \hat{a}^{+}\underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^{+}]}_{+1} + \underbrace{[\hat{a}^{+}, \hat{a}^{+}]}_{0}\hat{a} = +\hat{a}^{+}} = \hat{N}\hat{a}^{+} - \hat{a}^{+}\hat{N}$

$\Rightarrow$ anhand all dieser Vertauschungsrelationen können wir nun alle Eigenwerte und Eigenzustände von $\hat{H}$ des harmon. Osz. bestimmen:

Seien $|\lambda\rangle$ die Eigenzustände von $\hat{N}$ (und $\hat{H}$): $\boxed{\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle}$
mit $\langle\lambda|\lambda\rangle = 1$. Dann gilt: hermitesch $\Rightarrow \lambda \in \mathbb{R}$, s.o.

i) $\langle\lambda|\hat{N}|\lambda\rangle = \langle\lambda|\hat{a}^{+}\hat{a}|\lambda\rangle = \langle\hat{a}\lambda|\hat{a}\lambda\rangle = \||\hat{a}\lambda\rangle\|^2 \geq 0$

$= \langle\lambda|\lambda|\lambda\rangle \overset{\text{linear}}{=} \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle = \lambda$

Norm² des Zustandes $\hat{a}|\lambda\rangle \in$ Hilbertraum V

$\Rightarrow$ $\boxed{\lambda \geq 0}$ $\forall$ Eigenzustände von $\hat{N}$

ii) $\hat{N}\hat{a}|\lambda\rangle = (\hat{a}\hat{N} + [\hat{N}, \hat{a}]) = (\hat{a}\hat{N} - \hat{a})|\lambda\rangle = \hat{a}(\hat{N} - 1)|\lambda\rangle = \hat{a}(\lambda - 1)|\lambda\rangle$
$= (\lambda - 1)\hat{a}|\lambda\rangle$

$\Rightarrow$ wenn $|\lambda\rangle$ Eigenzustand mit Eigenwert λ ist
$\hat{a}|\lambda\rangle$ — " — " — " — $(\lambda - 1)$. D.h. $\hat{a}$ erzeugt Zustand mit um 1 absteigender Energie = Absteigeoperator.

iii) $\underline{\hat N \hat a^\dagger |\lambda\rangle} = (\hat a^\dagger \hat N + [\hat N, \hat a^\dagger])|\lambda\rangle = (\hat a^\dagger \hat N + \hat a^\dagger)|\lambda\rangle = \hat a^\dagger(\hat N+1)|\lambda\rangle$

$= \underline{(\lambda+1)\hat a^\dagger|\lambda\rangle}$

d.h. $\hat a^\dagger|\lambda\rangle$ ist Eigenzustand mit Eigenwert $\lambda+1$, d.h. $\hat a^\dagger$ erzeugt Zustand mit um +1 aufsteigender Energie = Aufsteigeoperator.

Insbesondere haben durch wiederholte Anwendung (und Durchtauschen von $\hat N$) die Zustände $(\hat a)^n|\lambda\rangle$ den Eigenwert $\lambda-n$

$(\hat a^\dagger)^n|\lambda\rangle$ " " $\lambda+n$

Wegen i) gilt, daß alle Eigenwerte nichtnegativ sind, d.h. es muß gelten daß $\boxed{\lambda\in\{0,1,2,\dots\}}$ zu Eigenzuständen $|\lambda\rangle$

$\boxed{\text{und} \quad \hat a|0\rangle = 0}$ (da sonst ein Zustand mit neg. Eigenwert erzeugt würde!

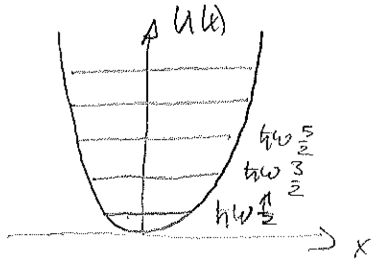
• Der Zustand $\underline{|0\rangle \text{ heißt Grundzustand}}$ (und wird von $\hat a$ vernichtet).

Von nun an nennen wir $\lambda = n \in \mathbb{N}_0$, und es gilt

$$\boxed{\hat N|n\rangle = n|n\rangle, \quad (\hat H|n\rangle = \hbar\omega(\hat N+\tfrac12)|n\rangle = \hbar\omega(n+\tfrac12)|n\rangle}$$

d.h. die erlaubten Energien lauten $\hbar\omega\frac12, \hbar\omega\frac32 \dots$

und sind äquidistant: $\boxed{E_n = \hbar\omega(n+\tfrac12)}$, $n\in\mathbb{N}$



* in der klassischen Mechanik wäre im Grundzustand die Energie null, mit $x(t)=0=p(t)$. Aufgrund der Unschärferelation ist dies in der QM aber nicht möglich, siehe ü 9.1 wo die entsprechenden Erwartungswerte berechnet werden.

• Die höheren angeregten Energiezustände $|n\rangle$ können wir mittels Anwendung von $\hat a^\dagger$ erzeugen: $|n\rangle = C_n(\hat a^\dagger)^n|0\rangle$.

- da wir zu Beginn $\langle n|n\rangle = 1$ verlangt haben, müssen wir noch den Proportionalitätsfaktor C_n bestimmen. Wir beginnen mit $|0\rangle$, $\langle 0|0\rangle = 1$.

<u>Bestimmung der Normierung:</u> $C_n \neq 0 \ \forall n \in \mathbb{N}$. Sei $n \geq 1$

$$|n\rangle = C_n (\hat{a}^+)^n |0\rangle = C_n \hat{a}^+ (\hat{a}^+)^{n-1} |0\rangle = \frac{C_n}{C_{n-1}} \hat{a}^+ |n-1\rangle$$

$$\Rightarrow 1 = \langle n|n\rangle = \langle n-1| \hat{a} \frac{C_n^*}{C_{n-1}^*} \frac{C_n}{C_{n-1}} \hat{a}^+ |n-1\rangle = \left|\frac{C_n}{C_{n-1}}\right|^2 \langle n-1| \underbrace{\hat{a}\hat{a}^+}_{} |n-1\rangle$$

$$\hat{a}\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{a} + [\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{N} + 1$$

$$= \left|\frac{C_n}{C_{n-1}}\right|^2 \langle n-1| (n-1+1) |n-1\rangle = n \left|\frac{C_n}{C_{n-1}}\right|^2 \underbrace{\langle n-1|n-1\rangle}_{1}$$

$\Rightarrow |C_n| = \dfrac{|C_{n-1}|}{\sqrt{n}}$, $n \geq 1$ mit Anfangsbed. $C_0 = 1$ da $C_0 (\hat{a}^+)^0 |0\rangle = C_0 |0\rangle$ bereits normiert.
(können wir als reell wählen)

$\Rightarrow |C_1| = \dfrac{1}{\sqrt{1}} = 1$, $|C_2| = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$, $|C_3| = \dfrac{\frac{1}{\sqrt{2}}}{\sqrt{3}} = \dfrac{1}{\sqrt{2\cdot 3}}$ usw

(Induktion) $\Rightarrow$ $\boxed{|C_n| = \dfrac{1}{\sqrt{n!}}}$, für $n \geq 0$ da $0! = 1$

* Wir werden die C_n reell wählen, also $C_n = \dfrac{1}{\sqrt{n!}}$ $\Rightarrow \boxed{|n\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle}$

$\Rightarrow$ umbilden (für $n \to n+1$): $|n+1\rangle = \dfrac{C_{n+1}}{C_n} \hat{a}^+ |n\rangle = \dfrac{1 \cdot \sqrt{n!}}{\sqrt{(n+1)!}} \hat{a}^+ |n\rangle$

$\Leftrightarrow$ $\boxed{\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1}\, |n+1\rangle}$

genauso kann gezeigt werden (Üb. g. 1) daß $\boxed{\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n}\, |n-1\rangle}$

Ü 2.6.

- <u>Bestimmung der Eigenfunktionen in Ortsdarstellung</u>

- es gilt $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$, wir beginnen mit $n = 0$, dem

<u>Grundzustand:</u>

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad \overset{\langle x|\cdot}{\Rightarrow} \quad \int dx' \langle x|\hat{a}|x'\rangle \underbrace{\langle x'|0\rangle}_{\psi_0(x')} = 0$$

$\uparrow$ $\hat{1} = \int dx' |x'\rangle\langle x'|$ $\qquad$ $\uparrow$ Def. ansehen

$$\Rightarrow 0 = \int dx' \langle x | \left(\sqrt{\tfrac{m\omega}{2\hbar}}\, \hat{x} + i \tfrac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\, \hat{p} \right) | x' \rangle \psi_0(x')$$

- benutze S.53: $\langle x|\hat{x}|x'\rangle = \langle x|x'|x'\rangle = x'\langle x|x'\rangle \overset{S.53}{=} x'\delta(x-x') = x\delta(x-x')$

sowie S.54: $\langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar \frac{d}{dx}\delta(x-x')$

$$\Rightarrow 0 = \sqrt{\tfrac{m\omega}{2\hbar}}\, x\,\psi_0(x) + \tfrac{\hbar}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \tfrac{d}{dx}\psi_0(x)$$ Differentialgl. für $\psi_0(x)$

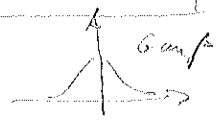
$$\Leftrightarrow 0 = \left(\sqrt{\tfrac{m\omega}{2\hbar}}\, x + i\tfrac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-i\hbar\tfrac{d}{dx}\right)\right)\psi_0(x) \Leftrightarrow \hat{a}\,\psi_0(x) = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d}{dx}\psi_0(x) = -\frac{m\omega}{\hbar}\, x\,\psi_0(x)}$$ Lösung $\psi_0(x) = c\,\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right]$

wobei $1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi_0(x)|^2 = \int dx \langle 0|x\rangle\langle x|0\rangle = \langle 0|0\rangle$ gelten soll

$$= |c|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} = |c|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \Rightarrow |c| = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}},$$ wähle $c \in \mathbb{R}$

$\Rightarrow$ normierte Grundzustandswellenfunktion $\boxed{\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right]}$



diese erfüllt die zeitunabhängige Schrödingergl.

$$\hat{H}\psi_0(x) = \frac{1}{2}\hbar\omega\,\psi_0(x) \underset{\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}}{\Leftrightarrow} \boxed{\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\psi_0(x) = \frac{\hbar\omega}{2}\psi_0(x)}$$

* Wie sehen die höheren Eigenzustände aus, d.h. die Lösung zu $\hat{H}\psi_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})\psi_n(x)$?

$$\underline{\psi_n(x)} = \langle x|n\rangle \overset{S.50}{=} \langle x| \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$$

$$\underset{\substack{\text{wie oben,}\\ \text{in Ortsdarst.}}}{=} \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, x \underset{\text{wegen } \hat{a}^\dagger}{-} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\right)^n \psi_0(x)$$

Können wir diese in geschlossener Form schreiben? def $\boxed{y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x}$

$$\Rightarrow \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \varphi_0(y) \,, \quad \text{damit} \quad 1 = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{dy}_{=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,dx} |\varphi_0(y)|^2$$

und entsprechend
$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \varphi_n(y)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} y - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{d}{dy}\right)^n \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \varphi_0(y)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{n!}\,(\sqrt{2})^n} \left(y - \frac{d}{dy}\right)^n \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\varphi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \left(y - \frac{d}{dy}\right)^n e^{-\frac{1}{2}y^2} = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(y)\, e^{-\frac{1}{2}y^2}}$$

wobei $\underline{H_n(y)} = e^{+\frac{1}{2}y^2} \left(y - \frac{d}{dy}\right)^n e^{-\frac{1}{2}y^2}$ das Hermite-Polynom vom Grad n

Bsp: $H_0(y) = 1$, $H_1(y) = 2y$, $H_2(y) = 4y^2 - 2$ usw.

Diese erfüllen folgende Rekursionsgleichung:

$$\left.\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \varphi_n(y) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy}\right) \varphi_n(y) \overset{s.S.}{=} \sqrt{n+1}\, \varphi_{n+1}(y) \\ \text{und} \quad \hat{a}\, \varphi_n(y) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y + \frac{d}{dy}\right) \varphi_n(y) = \sqrt{n}\, \varphi_{n-1}(y) \end{aligned}\right\} \text{Summe}$$

$$\Rightarrow \frac{2}{\sqrt{2}} y \varphi_n(y) = \sqrt{n+1}\, \varphi_{n+1}(y) + \sqrt{n}\, \varphi_{n-1}(y)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\sqrt{2}\, y}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(y)\, e^{-\frac{1}{2}y^2} = \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{2^{n+1}(n+1)! \sqrt{\pi}}} H_{n+1}(y)\, e^{-\frac{1}{2}y^2} + \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{2^{n-1}(n-1)! \sqrt{\pi}}} H_{n-1}(y)\, e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

$$\Rightarrow \boxed{2y H_n(y) - 2n H_{n-1}(y) = H_{n+1}(y)}$$

Die Hermite Polynome bzw. $\varphi_n(y)$ bilden eine ONB
$$\underline{\int_{-\infty}^{\infty} dy\, e^{-y^2} \frac{H_n(y)}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \frac{H_m(y)}{\sqrt{2^m m! \sqrt{\pi}}} = \delta_{nm}}$$