Illustration der GG für Systeme mit einem räumlichen Freiheitsgrad, speziell: linearer harmonischer Oszillator

1. GG: Schrödingersche Formulierung ("Wellenmechanik")
($\leftrightarrow$ Heisenbergsche "Matrizenmechanik")

Zustandsraum

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}) = \left\{ f : \mathbb{R} \to \mathbb{C} \;\middle|\; \int_{\mathbb{R}} dx\, |f(x)|^2 < +\infty \right\}$$

$$\langle f, g \rangle := \int_{\mathbb{R}} dx\, f^*(x)\, g(x)$$

$$\|\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} dx\, |\psi(x)|^2 = 1$$

ψ ZV (ZF)
"WF"

Beispiel:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\; e^{-\frac{[\alpha(x-a)]^2}{2}}, \qquad \alpha \in \mathbb{R}^+, \quad a \in \mathbb{R}$$

(α, a fest vorgegeben)

äquivalent zu ψ:

$$\varphi(x) = e^{i\gamma}\, \psi(x)$$

mit beliebigem festen konstanten $\gamma \in [0, 2\pi)$

$$|\psi(x)|^2 = |\varphi(x)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\, e^{-[\alpha(x-a)]^2}$$

$$\int_{\mathbb{R}} dx\, |\psi(x)|^2 = \int_{\mathbb{R}} dx\, |\varphi(x)|^2 = 1 \;\checkmark$$

Beachte: Mit

$$\varphi(x) = e^{i\gamma}\,\psi(x)$$

folgt auch

$$\tilde{\varphi}(p) = e^{i\gamma}\,\tilde{\psi}(p)$$

und somit

$$|\tilde{\psi}(p)|^2 = |\tilde{\varphi}(p)|^2 .$$

Im Falle

$$\varphi(x) = e^{i\gamma(x)}\,\psi(x)$$

wäre zwar ebenfalls

$$|\psi(x)|^2 = |\varphi(x)|^2 ,$$

aber

$$|\tilde{\psi}(p)|^2 \neq |\tilde{\varphi}(p)|^2 \quad ! \qquad \bullet$$

φ anderer "Zustand" als ψ!

2.GG:

Ortsoperator $\hat{x}$

Impulsoperator $\hat{p}$

Hamiltonoperator $\hat{H} = \underbrace{\frac{\hat{p}^2}{2m}}_{\hat{T}} + \underbrace{V(\hat{x})}_{\hat{V}}$

$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$

fundamentale Observablen:

$\mathcal{X} \longrightarrow \hat{x}:$ $\quad (\hat{x}f)(x) := x\,f(x)$ $\quad \mathcal{D}_{\hat{x}}$

"$\hat{x} = x$"

$\mathcal{P} \longrightarrow \hat{p}:$ $\quad (\hat{p}f)(x) := -i\hbar f'(x)$ $\quad \mathcal{D}_{\hat{p}}$

"$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$"

$$[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Kommutator von $\hat{A}, \hat{B}$

kanonische Kommutatorbeziehung:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \hat{1}$$

Aufg. 33

"fundamentale Kommutator-(Vertauschungs-) Beziehung"

Bemerkung: Diese Beziehung drückt die "totale" Unverträglichkeit von $\mathcal{X}$ und $\mathcal{P}$ aus und führt zur Heisenbergschen Unbestimmtheits-beziehung $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ (s. später).

Lösung des Eigenwertproblems von $\hat{x}$:

Eigenwertgleichung: $(\hat{x}\, u_{x'})(x) = x' u_{x'}(x)$ .... $\hat{A} u_a = a u_a$

Spektrum: $\sigma(\hat{x}) = \sigma_k(\hat{x}) = \mathbb{R}$

Eigenfunktionen: $u_{x'}(x) = \delta(x - x')$

Orthogonalität und „Normierung“:

$$\langle u_{x'}, u_{x''} \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, u_{x'}^*(x)\, u_{x''}(x) = \delta(x' - x'')$$

Entwicklungssatz:

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}} dx' \langle u_{x'}, f \rangle\, u_{x'}(x), \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R})$$

$$f = \int_{\sigma_k(\hat{A})} da \langle u_a, f \rangle u_a$$

Integraltheorem

mit $\langle u_{x'}, f \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, u_{x'}^*(x)\, f(x) = f(x')$,

also

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}} dx' f(x')\, u_{x'}(x) = \int_{\mathbb{R}} dx' f(x')\, \delta(x - x'), \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R})$$

banales "Integraltheorem"

Lösung des Eigenwertproblems von $\widehat{p}$:

Eigenwertgleichung: $(\widehat{p}\,u_{p'})(x) = p'\,u_{p'}(x)$

Spektrum: $\sigma(\widehat{p}) = \sigma_{\mathrm{k}}(\widehat{p}) = \mathbb{R}$

Eigenfunktionen: $u_{p'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{(i/\hbar)p'x}$

Orthogonalität und „Normierung“:

$$\langle\, u_{p'}, u_{p''} \,\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, u^*_{p'}(x)\, u_{p''}(x) = \delta(p' - p'')$$

Entwicklungssatz (Fouriersches Integraltheorem):

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}} dp' \,\langle\, u_{p'}, f \,\rangle\, u_{p'}(x)\,, \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R})$$

$$\text{mit} \quad \langle\, u_{p'}, f \,\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, u^*_{p'}(x)\, f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-(i/\hbar)p'x}\, f(x)$$

$$=: \tilde{f}(p')\,, \quad \tilde{f} \text{ Fouriertransformierte von } f\,,$$

also

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}} dp'\, \tilde{f}(p')\, u_{p'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dp'\, \tilde{f}(p')\, e^{(i/\hbar)p'x}\,, \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R})$$

Fouriersches Integraltheorem

Lösung des Eigenwertproblems von $\hat{T}$:

Eigenwertgleichung: $(\hat{T} u_{\pm p'})(x) = \frac{p'^2}{2m}\, u_{\pm p'}(x)$

Entartung!
($\frac{p'^2}{2m}$ zweifach)

Spektrum: $\sigma(\hat{T}) = \sigma_k(\hat{T}) = \left\{ \frac{p'^2}{2m} \,,\; p' \in \mathbb{R} \right\}$

Eigenfunktionen: $u_{p'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{(i/\hbar)p'x}$

Orthogonalität und „Normierung":

$$\langle u_{p'}, u_{p''} \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, u^*_{p'}(x)\, u_{p''}(x) = \delta(p' - p'')$$

Entwicklungssatz (Fouriersches Integraltheorem):

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}} dp' \langle u_{p'}, f \rangle\, u_{p'}(x)\,, \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R})$$

mit $\langle u_{p'}, f \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, u^*_{p'}(x)\, f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-(i/\hbar)p'x} f(x)$

$=: \tilde{f}(p')\,,$ $\quad \tilde{f}$ Fouriertransformierte von f,

also

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}} dp'\, \tilde{f}(p')\, u_{p'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dp'\, \tilde{f}(p')\, e^{(i/\hbar)p'x}\,, \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R})$$

$\hat{A} u_{a\alpha} = a u_{a\alpha}\,, \quad \alpha = 1, 2, \ldots, g(a)$

$\langle u_{a'\alpha'}, u_{a''\alpha''} \rangle = \delta(a' - a'')\,\delta_{\alpha'\alpha''}$

bzw.

Eigenwertgleichung: $(\hat{T} u_{T\tau})(x) = T\, u_{T\tau}(x)\,, \quad \tau = 1, 2$

Spektrum: $\sigma(\hat{T}) = \sigma_{\mathrm{k}}(\hat{T}) = \mathbb{R}_0^+$

$T = \frac{p'^2}{2m}$

$p' = \pm \sqrt{2mT}$

Eigenfunktionen:

$$u_{T1}(x) = \frac{\left(\frac{m}{2T}\right)^{1/4}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{(i/\hbar)\sqrt{2mT}\,x}$$

$$u_{T2}(x) = \frac{\left(\frac{m}{2T}\right)^{1/4}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{-(i/\hbar)\sqrt{2mT}\,x}$$

Orthogonalität und „Normierung“:

$$\langle u_{T'\tau'}, u_{T''\tau''} \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, u^*_{T'\tau'}(x)\, u_{T''\tau''}(x) = \delta(T' - T'')\,\delta_{\tau'\tau''}$$

Beachte: $\delta(\alpha\xi) = \frac{1}{|\alpha|}\delta(\xi)$

Entwicklungssatz: s. Aufgabe 34

Linearer harmonischer Oszillator mit Kraftzentrum im Ursprung: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}\hat{x}^2$

Lösung des ***Eigenwertproblems*** *von* $\hat{H}$:

Eigenwertgleichung: $(\hat{H} u_n)(x) = E_n u_n(x)\,, \quad E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$

Spektrum: $\sigma(\hat{H}) = \sigma_{\mathrm{d}}(\hat{H}) = \{ E_n ,\; n \in \mathbb{N}_0 \}$

Eigenfunktionen: $u_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n\, n!\, \sqrt{\pi}}}\, \exp\Big[-\frac{(\alpha x)^2}{2}\Big]\, H_n(\alpha x)$

Orthogonalität und Normierung:

$$\langle u_{n'}, u_{n''} \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, u^*_{n'}(x)\, u_{n''}(x) = \delta_{n'n''}$$

Entwicklungssatz:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle u_n, f \rangle\, u_n(x)\,, \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R})$$

mit $\quad \langle u_n, f \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx'\, u^*_n(x')\, f(x')$

Entwicklung
nach Hermiteschen
Orthogonalfunktionen

Eigenwertgleichung: $(\hat{H} u_{nlm_l})(\vec{r}) = E_n u_{nlm_l}(\vec{r})\,, \quad E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$

$l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$ $\hat{\vec{\ell}}^{\,2}$

$m_l = -l, -l+1, \ldots, +l$ $\hat{\ell}_z$

diskretes Spektrum: $\sigma_d(\hat{H}) = \{E_n,\ n \in \mathbb{N}\}$

Eigenfunktionen: $u_{nlm_l}(\vec{r}) = R_{nl}(r)\, Y_{lm_l}(\vartheta, \varphi)$

$\sigma(\hat{H}) = \sigma_d(\hat{H}) \cup [0, +\infty)$!

$\sigma_k(\hat{H})$

H-Atom e⁻-p Streuung

E_n: $g_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) = n^2$

$u_{nr}\,,\ r = 1, 2, \ldots, g_n \longleftrightarrow u_{n\ell m_\ell}$

3.GG: $W(x) = |\langle u_x, \psi\rangle|^2 = |\psi(x)|^2$
$W(p) = |\langle u_p, \psi\rangle|^2 = |\tilde{\psi}(p)|^2$

Beispiel:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{[\alpha(x-a)]^2}{2}} \quad , \quad \alpha \in \mathbb{R}^+,\ a \in \mathbb{R}$$

(α, a fest vorgegeben)

$$\tilde{\psi}(p) = \langle u_p, \psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, u_p^*(x)\psi(x)$$

$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\, \psi(x)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-\frac{[\alpha(x-a)]^2}{2} - \frac{i}{\hbar}px}$$

= s. 37

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar\alpha\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{p^2}{2\hbar^2\alpha^2} - \frac{i}{\hbar}pa}$$

$\Rightarrow$

$$\boxed{\begin{aligned} W(x) &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\, e^{-[\alpha(x-a)]^2} \\ W(p) &= \frac{1}{\hbar\alpha\sqrt{\pi}}\, e^{-\frac{p^2}{\hbar^2\alpha^2}} \end{aligned}}$$

Gaußverteilung mit Mittelwert a

Gaußverteilung mit Mittelwert 0

s. später

$$\int_{\mathbb{R}} dx\, W(x) = \int_{\mathbb{R}} dp\, W(p) = 1 \ \checkmark$$

Speziell: Linearer harmonischer Oszillator mit Kraftzentrum im Ursprung

$\psi(x)$ wie oben, aber mit dem speziellen α

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}$$

$\tilde{\psi}(p)$, $W(x)$, $W(p)$: oben dieses α einsetzen

Physikal. Bedeutung später!

Wa-Verteilung für Gesamtenergie $\mathcal{E}$:

$$\boxed{W_n = |\langle u_n, \psi\rangle|^2 = |c_n|^2}$$

Für das ψ von oben mit $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}$:

$$c_n = \langle u_n, \psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, u_n^*(x)\psi(x) \qquad \psi(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{[\alpha(x-a)]^2}{2}}$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-\frac{(\alpha x)^2}{2}} H_n(\alpha x)\psi(x)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-\frac{\alpha^2}{2}[(x-a)^2 + x^2]} H_n(\alpha x)$$

$$\xi = \alpha x$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi}} \int_{\mathbb{R}} d\xi\, e^{-\frac{1}{2}[(\xi - \alpha a)^2 + \xi^2]} H_n(\xi)$$

$= $ s. 38

$$c_n = \frac{(\alpha a)^n}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{(\alpha a)^2}{4}}$$

$$\boxed{W_n = \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda} \quad \text{mit} \quad \lambda := \frac{(\alpha a)^2}{2}}$$

Poisson=verteilung
s. später

$$\sum_{n=0}^{\infty} W_n = 1 \quad ✓$$

Aufg. 39

Entwicklung der ZF ψ nach Energie-EF u_n:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{[\alpha(x-a)]^2}{2}} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x) = \dots$$

s. oben   s. früher

Entwicklungssatz

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \langle u_n, \psi \rangle u_n$$

4. GG:

Wie muß man Gesamtheit linearer harmonischer Oszillatoren zum Zeitpunkt $t_0 = 0-$ präparieren, daß die ZF für $t = 0+$ durch ($\psi_t(x) \equiv \psi(x,t)$)

$$\psi_0(x) \equiv \psi(x,0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{[\alpha(x-a)]^2}{2}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}$$

gegeben ist (und die Kraftzentren für $t = 0+$ im Ursprung sind)

Beachte: $\psi(x,0)$ ist dann das beim 1. GG und 3. GG als Beispiel betrachtete $\psi(x)$ und entsprechend sind dann

$\tilde{\psi}(p,0) = \langle u_p, \psi_0 \rangle$, $c_n(0) = \langle u_n, \psi_0 \rangle$,

$W(x,0)$, $W(p,0)$, $W_n(0)$

durch die früher erhaltenen Größen

$\tilde{\psi}(p)$, c_n , $W(x)$, $W(p)$, W_n

gegeben. ●

Schlüssel für die Beantwortung dieser Frage:

$$u_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{(\alpha x)^2}{2}}$$

ist EF von

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

Energie von lin. harm. Osz. mit Kraftzentrum im Ursprung ($\mathcal{G}$)

zum EW $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \Longrightarrow$

$$\psi_0(x) \equiv \psi(x,0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{[\alpha(x-a)]^2}{2}} = u_0(x-a) = u_{a0}(x)$$

ist EF von

$$\hat{H}_a := \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}(\hat{x} - a\hat{1})^2 \longleftrightarrow$$

Energie von lin. harm. Osz. mit Kraftzentrum am Ort $x=a$ ($\mathcal{G}_a$)

zum EW $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$!

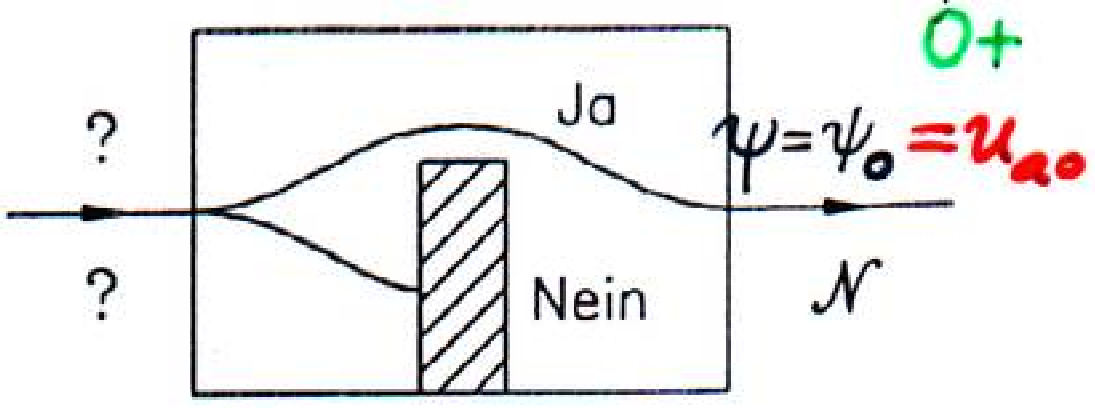
Damit Antwort:

plötzliche Verschiebung des Kraftzentrums *)

$t_0 = 0-$

$0+$

Oszillatoren mit Kraftzentrum bei $x = a$



Oszillatoren mit Kraftzentrum bei $x = 0$

$\mathcal{G}_a$: Meßwert E_0?

Vollständige Präparation

*) Änderung des Hamiltonoperators; dabei bleibt ZF unverändert (ψ_0)!

5. GG: s. später

Mit Hilfe dieses GG werden wir aus obigem $\psi_0(x) \equiv \psi(x,0)$ für die Oszillatoren mit Kraftzentrum im Ursprung $\psi(x,t)$ und damit $\tilde{\psi}(p,t)$, $W(x,t)$, $W(p,t)$, $c_n(t)$ und $W_n(t)$ berechnen.

Vorher noch eine Übung zum 3. + 4. GG!

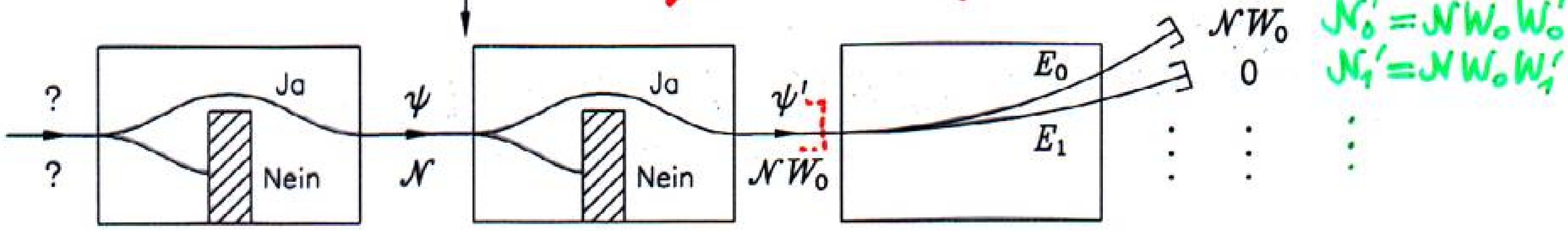
Versuch: Die folgende Präparation, Umpräparation und Messung sollen "unmittelbar hintereinander" durchgeführt werden. (Zeit deshalb nicht spezifiziert.)

Aber: s. später ("stationäre Zustände")

Präparation wie auf G12!

plötzliche Verschiebung des Kraft= zentrums

Konsistenz des 3. und 4. GG!



$\mathcal{G}_{Ja}$: Meßwert E_0?

$\mathcal{G}$: Meßwert E_0?

$\mathcal{G}$: Vollständige Filterung + Zählung

Vollständige Präparation

Umpräparation [Messung]

Messung

4.GG: $\psi(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{[\alpha(x-a)]^2}{2}}$

4.GG: $\psi'(x) = u_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{(\alpha x)^2}{2}}$

[...]: 3.GG: $W_0 = |\langle u_0, \psi\rangle|^2 = e^{-\frac{(\alpha a)^2}{2}}$

3.GG: $W_n' = |\langle u_n, \psi'\rangle|^2 = |\langle u_n, u_0\rangle|^2 = \delta_{n0}$,

also $\mathcal{N}_0' = \mathcal{N} W_0 W_0' = \mathcal{N} W_0$,

$\mathcal{N}_n' = \mathcal{N} W_0 W_n' = 0$ für $n = 1, 2, 3, \cdots$

5. GG: $t_0 = 0$ $\cancel{t}$

$$\psi_t(x) \equiv \psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t)\, u_n(x)$$

$$c_n(t) = \langle u_n, \psi_t \rangle = c_n(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$c_n(0) = \langle u_n, \psi_0 \rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\, u_n^*(x)\, \psi_0(x)$$

$$\psi_0(x) \equiv \psi(x,0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{[\alpha(x-a)]^2}{2}}$$

$$\Longrightarrow \qquad c_n(0) = c_n = \frac{(\alpha a)^n}{\sqrt{2^n n!}}\, e^{-\frac{(\alpha a)^2}{4}} \qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}$$

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha a)^n}{\sqrt{2^n n!}}\, e^{-\frac{(\alpha a)^2}{4}}\, e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega_0 t} \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{(\alpha x)^2}{2}} H_n(\underbrace{\alpha x}_{\xi})$$

Kann geschlossen aufsummiert werden mit Hilfe der "erzeugenden Funktion" der Hermitepolynome

$$F(s,\xi) := e^{-s^2 + 2\xi s} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!}\, s^n$$

s. 42

Ergebnis:

$$\psi_t(x) \equiv \psi(x,t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{[\alpha(x - a\cos\omega_0 t)]^2}{2}}\, e^{-i\left(\frac{\omega_0 t}{2} + \alpha^2 a x \sin\omega_0 t - \frac{(\alpha a)^2}{4}\sin 2\omega_0 t\right)}$$

$$\boxed{W(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\, e^{-[\alpha(x - a\cos\omega_0 t)]^2}} \qquad t \geq 0 \qquad \psi(x,0) \checkmark \quad W(x,0) \checkmark$$

$$\tilde{\psi}_t(p) \equiv \tilde{\psi}(p,t) = \langle u_p, \psi_t \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\, \psi(x,t) = \text{s. } 43$$

$$\tilde{\psi}_t(p) \equiv \tilde{\psi}(p,t) = \frac{1}{\sqrt{\hbar\alpha\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{(p + \hbar\alpha^2 a \sin\omega_0 t)^2}{2\hbar^2\alpha^2}}\, e^{-i\left(\frac{\omega_0 t}{2} + \frac{pa}{\hbar}\cos\omega_0 t + \frac{(\alpha a)^2}{4}\sin 2\omega_0 t\right)}$$

$$\boxed{W(p,t) = |\tilde{\psi}(p,t)|^2 = \frac{1}{\hbar\alpha\sqrt{\pi}}\, e^{-\frac{(p + \hbar\alpha^2 a \sin\omega_0 t)^2}{\hbar^2\alpha^2}}} \qquad t \geq 0 \qquad \tilde{\psi}(p,0) \checkmark \quad W(p,0) \checkmark$$

$$c_n(t) = \langle u_n, \psi_t \rangle = c_n(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$\boxed{W_n(t) = |c_n(t)|^2 = |c_n(0)|^2 = \frac{\left(\frac{\alpha^2 a^2}{2}\right)^n}{n!}\, e^{-\frac{\alpha^2 a^2}{2}}} \qquad t \geq 0$$

Mittelwerte, Unbestimmtheiten:

Gaußverteilung: Die kontinuierliche Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$w(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\delta} \exp\left[-\frac{(\xi-\xi_0)^2}{2\delta^2}\right], \quad \delta \in \mathbb{R}^+, \ \xi_0 \in \mathbb{R} \ \text{(fest)} \tag{4.271}$$

der Variablen $\xi \in \mathbb{R}$ wird als Gaußverteilung bezeichnet. Ihre niedrigsten Momente sind gegeben durch:

$$\int_{\mathbb{R}} d\xi\, w(\xi) = 1 \qquad \text{Gesamtwahrscheinlichkeit} \tag{4.272}$$

$$\bar{\xi} = \int_{\mathbb{R}} d\xi\, \xi\, w(\xi) = \xi_0 \qquad \text{Mittelwert} \tag{4.273}$$

$$\overline{\xi^2} = \int_{\mathbb{R}} d\xi\, \xi^2\, w(\xi) = \delta^2 + \xi_0^2 \qquad \text{Mittelwert des Quadrates} \tag{4.274}$$

$$(\Delta\xi)^2 = \overline{(\xi-\bar{\xi})^2} = \overline{\xi^2} - (\bar{\xi})^2 = \delta^2 \qquad \text{mittlere quadratische Abweichung vom Mittelwert} \tag{4.275}$$

Teilchenort $\mathcal{X}$, Teilchenimpuls $\mathcal{P}$

$$\alpha^2 = \frac{m\omega_0}{\hbar}$$

$$W(x,t) = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\, e^{-\alpha^2 (x - a\cos\omega_0 t)^2}$$

$$W(p,t) = \frac{1}{\hbar\alpha\sqrt{\pi}}\, e^{-\frac{(p+\hbar\alpha^2 a \sin\omega_0 t)^2}{\hbar^2\alpha^2}} \qquad t \geq 0$$

Verteilungen nur über Mittel= wert zeitabhängig !

$$\langle\hat{x}\rangle_t = a\cos\omega_0 t = \langle\hat{x}\rangle_0 \cos\omega_0 t$$

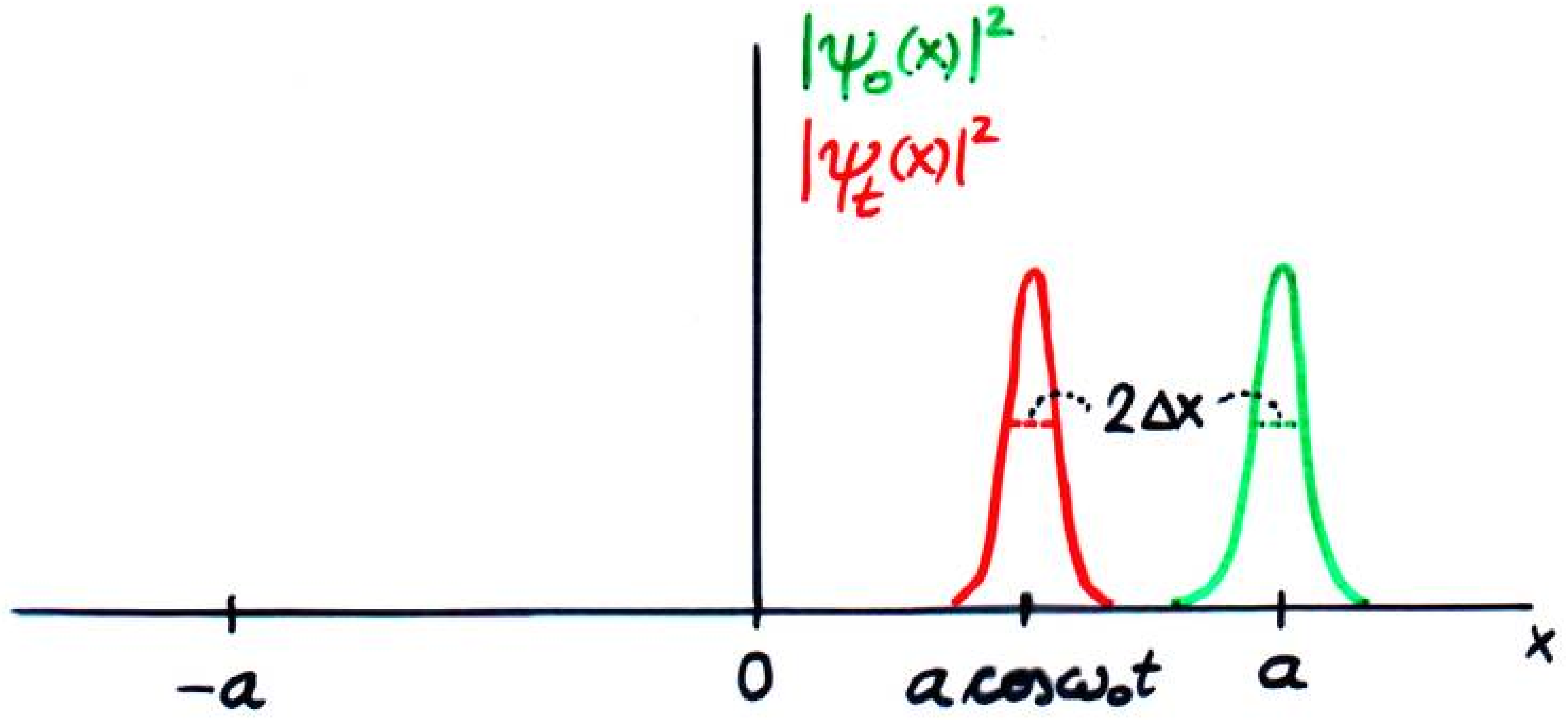
$$\langle\hat{p}\rangle_t = -\hbar\alpha^2 a \sin\omega_0 t = -m\omega_0 a \sin\omega_0 t$$

$$= -m\omega_0 \langle\hat{x}\rangle_0 \sin\omega_0 t \Rightarrow$$

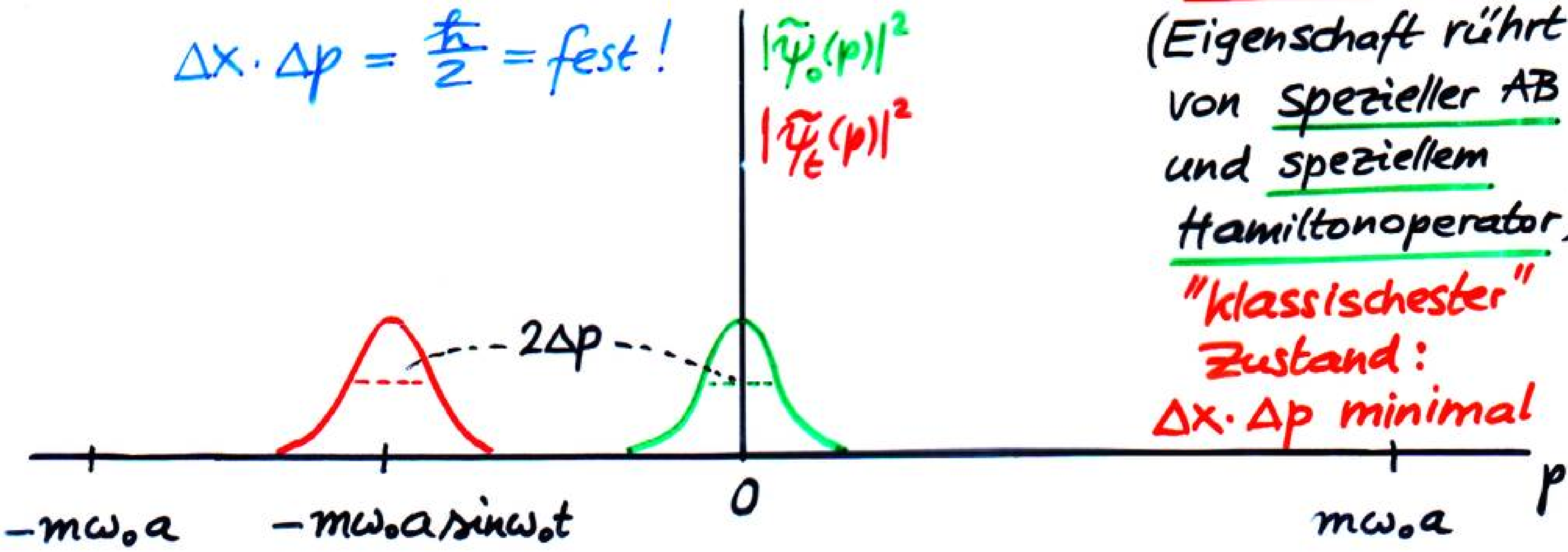
$$\langle\hat{p}\rangle_0 = 0$$

$$\left.\begin{aligned} (\Delta x)_t &= \frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} = (\Delta x)_0 \equiv \Delta x \\ (\Delta p)_t &= \frac{\hbar\alpha}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}} = (\Delta p)_0 \equiv \Delta p \end{aligned}\right\} \quad \Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

Heisenberg $\geq \frac{\hbar}{2}$!



$\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} = \text{fest}\,!$



"kohärenter" Zustand

(Eigenschaft rührt von spezieller AB und speziellem Hamiltonoperator)

"klassischester" Zustand: $\Delta x \cdot \Delta p$ minimal

Klassischer linearer harmonischer Oszillator

$$x(t) = x(0)\cos\omega_0 t + \frac{p(0)}{m\omega_0}\sin\omega_0 t$$

$$p(t) = p(0)\cos\omega_0 t - m\omega_0 x(0)\sin\omega_0 t$$

Speziell für $x(0) = a$, $p(0) = 0$

$$x(t) = a\cos\omega_0 t \quad , \quad p(t) = -m\omega_0 a \sin\omega_0 t$$

QM: im Beispiel $\langle\hat{x}\rangle_0 = a$, $\langle\hat{p}\rangle_0 = 0$

$$\langle\hat{x}\rangle_t = a\cos\omega_0 t \quad , \quad \langle\hat{p}\rangle_t = -m\omega_0 a \sin\omega_0 t$$

!

Mittelwerte erfüllen klass. Beziehungen (für beliebige AB!)

Poissonverteilung: Die diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$w_n = \frac{\lambda^n}{n!}\, e^{-\lambda}, \quad \lambda \in \mathbb{R}^+ \text{ (fest)} \tag{4.276}$$

mit $n \in \mathbb{N}_0$ wird als Poissonverteilung bezeichnet. Ihre niedrigsten Momente sind gegeben durch:

$$\sum_{n=0}^{\infty} w_n = 1 \qquad \text{Gesamtwahrscheinlichkeit} \tag{4.277}$$

$$\bar{n} = \sum_{n=0}^{\infty} n\, w_n = \lambda \qquad \text{Mittelwert} \tag{4.278}$$

$$\overline{n^2} = \sum_{n=0}^{\infty} n^2 w_n = \lambda(\lambda+1) \qquad \text{Mittelwert des Quadrates} \tag{4.279}$$

$$(\Delta n)^2 = \overline{(n-\bar{n})^2} = \overline{n^2} - (\bar{n})^2 = \lambda \qquad \text{mittlere quadratische Abweichung vom Mittelwert} \tag{4.280}$$

Teilchenenergie $\mathcal{H}$:

$$W_n(t) = W_n(0) = \frac{\left(\frac{\alpha^2 a^2}{2}\right)^n}{n!}\, e^{-\frac{\alpha^2 a^2}{2}} \equiv W_n \quad , \quad \alpha^2 = \frac{m\omega_0}{\hbar}$$

Poissonverteilung mit $\lambda = \frac{\alpha^2 a^2}{2} = \frac{m\omega_0 a^2}{2\hbar}$ $\quad (*)$

Energieerhaltung in QM: Wa-Verteilung bzgl. Energie und damit auch deren Momente (Mittelwert, Unbestimmtheit etc.) zeitunabhängig.

Im folgenden: $\langle \hat{H} \rangle_t = \langle \hat{H} \rangle_0 \equiv \langle \hat{H} \rangle$ etc.

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n W_n = \sum_{n=0}^{\infty} (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_0 W_n$$

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n^2 W_n = \sum_{n=0}^{\infty} (n+\tfrac{1}{2})^2 (\hbar\omega_0)^2 W_n$$

46 Lösung: $\langle \hat{H} \rangle = (\bar{n} + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_0 = (\lambda + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_0$

mit λ gemäß $(*)$

$$\lambda = \frac{m\omega_0 a^2}{2\hbar}$$

$$\langle \hat{H} \rangle = (\lambda + \tfrac{1}{2})\hbar\omega_0 = \frac{m\omega_0 a^2}{2\cancel{\hbar}}\cancel{\hbar}\omega_0 + \tfrac{1}{2}\hbar\omega_0$$

$$\boxed{\langle \hat{H} \rangle = \frac{m\omega_0^2}{2} a^2 + \tfrac{1}{2}\hbar\omega_0 = V(a) + E_0}$$

Klassisch gilt für Oszillator mit $x(0) = a$, $p(0) = 0$

$$E(t) = E(0) \equiv E_{kl} = V(a)$$

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{(n+\tfrac{1}{2})^2}_{n^2+n+\frac{1}{4}} (\hbar\omega_0)^2 W_n \qquad E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_0$$

$$= (\underbrace{\overline{n^2}}_{\lambda(\lambda+1)} + \underbrace{\overline{n}}_{\lambda} + \tfrac{1}{4})(\hbar\omega_0)^2$$

$$(\Delta E)^2 = \langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2 = [\lambda(\lambda+1) + \lambda + \tfrac{1}{4} - \underbrace{(\lambda+\tfrac{1}{2})^2}_{\lambda^2+\lambda+\frac{1}{4}}] \cdot (\hbar\omega_0)^2$$

$$= (\cancel{\lambda^2} + \cancel{\lambda} + \lambda + \cancel{\tfrac{1}{4}} - \cancel{\lambda^2} - \cancel{\lambda} - \cancel{\tfrac{1}{4}})(\hbar\omega_0)^2$$

$$\boxed{\Delta E = \sqrt{\lambda}\,\hbar\omega_0 = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\, a\hbar\omega_0}$$

"Quasi"-
klassischer Grenzfall:

Liegt vor, falls

$$2\Delta x \ll a \quad \text{und} \quad 2\Delta p \ll m\omega_0 a$$

s. G17!

Beachte:

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \quad , \quad \Delta p = \sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}}$$

$$\Rightarrow \qquad \Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2} \; .$$

Macht man also Δx durch Wahl von größeren Werten von $m\omega_0$ kleiner, so wird Δp größer. Zahlenbeispiele zeigen, daß für makroskopische Oszillatoren dennoch beide Voraussetzungen extrem gut erfüllt werden können.

47 $m = 100\,g$, $\omega_0 = 10\,Hz$, $a = 10\,cm$

$\hbar = 10^{-27}\,erg \cdot s$

$$2\Delta x = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_0}} = 1{,}4 \cdot 10^{-15}\,cm \ll a = 10\,cm$$

$$m\omega_0 a = 10^4\,cm\,g\,s^{-1}$$

$$2\Delta p = \sqrt{2m\hbar\omega_0} = 1{,}4 \cdot 10^{-12}\,cm\,g\,s^{-1}$$

$$\ll m\omega_0 a = 10^4\,cm\,g\,s^{-1}$$

Jeweils ~ 16 Zehnerpotenzen!

Was folgt im "quasi"-klassischen Grenzfall für die Gesamtenergie der Oszillatoren?

$(2\Delta x)^2 \ll a^2$ bedeutet $4\frac{\hbar}{2m\omega_0} \ll a^2 \quad \Big| \cdot \frac{m\omega_0^2}{2}$

$\frac{m\omega_0^2}{2}a^2 \gg \hbar\omega_0$, d.h. $V(a) \gg \hbar\omega_0$

$$\langle\hat{H}\rangle = V(a) + E_0 \approx V(a) = E_{kl}$$

$$\frac{\Delta E}{\langle\hat{H}\rangle} \approx \frac{\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\, a\hbar\omega_0}{\frac{m\omega_0^2}{2}a^2} = \frac{\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_0}}}{a} = \frac{2\Delta x}{a} \ll 1$$

Im Beispiel:

$\langle\hat{H}\rangle \approx V(a) = E_{kl} = 0{,}5 \cdot 10^6$ erg

$\hbar\omega_0 \approx 10^{-26}$ erg

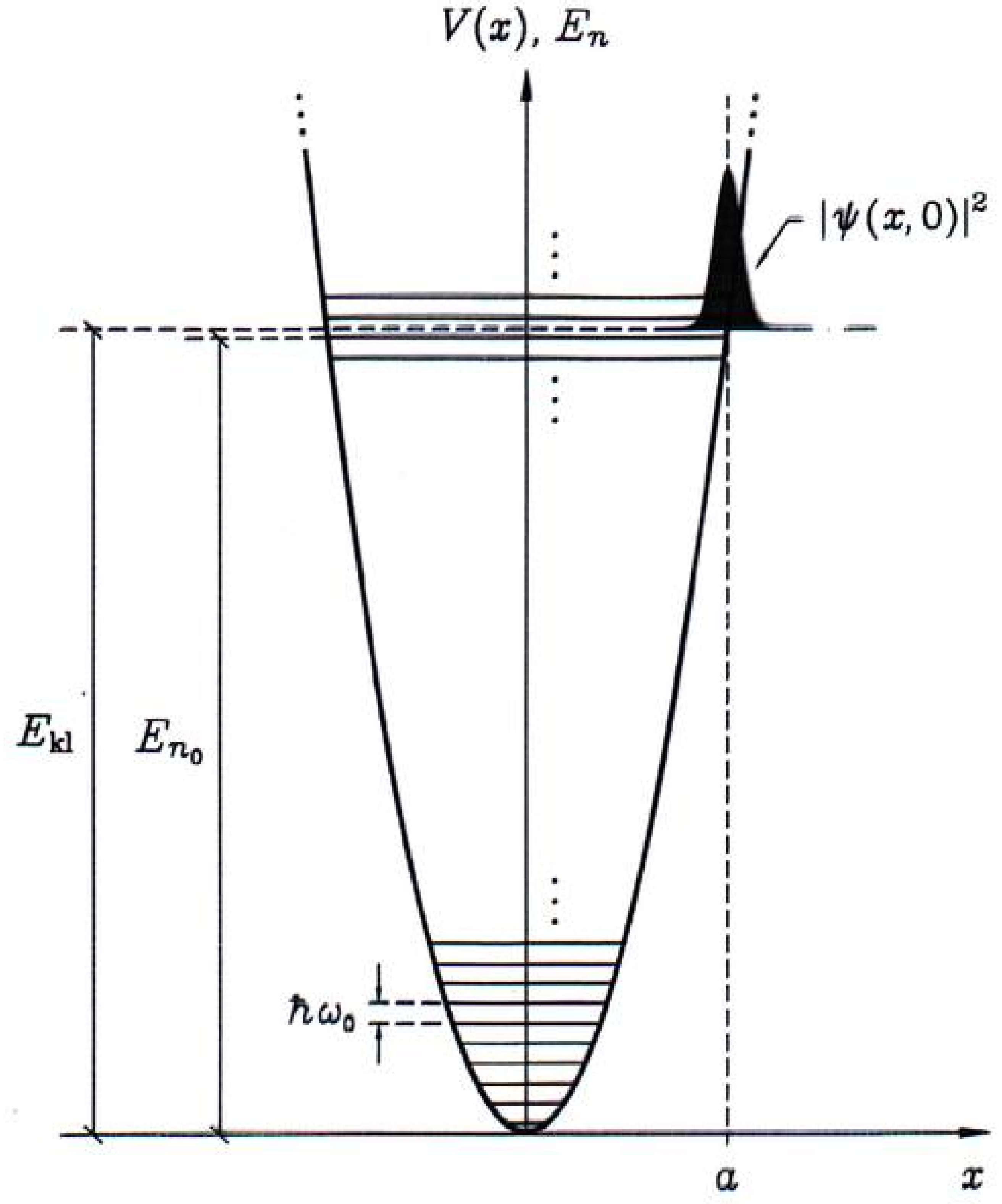
$\frac{\Delta E}{\langle\hat{H}\rangle} \approx 1{,}4 \cdot 10^{-16}$

$E_{n_0} \approx E_{kl}$ gibt $n_0 \approx 5 \cdot 10^{31}$

"Korrespondenzprinzip"

Aber:

$2\Delta E \approx 1{,}7 \cdot 10^{16}\, \hbar\omega_0$, d.h. in $\psi_t(x)$ tragen rund 10^{16} Summanden mit n um $5 \cdot 10^{31}$ bei!



$V(x),\ E_n$
$|\psi(x,0)|^2$
E_{kl}
E_{n_0}
$\hbar\omega_0$
a
x

Für mikroskopische Oszillatoren benötigt man natürlich die QM. Ein Zahlenbeispiel:

N_2-Molekül: $m = 14 m_p = 2\cdot 10^{-23}\,g$, $\omega_0 = 10^{12}\,Hz$ (IR)

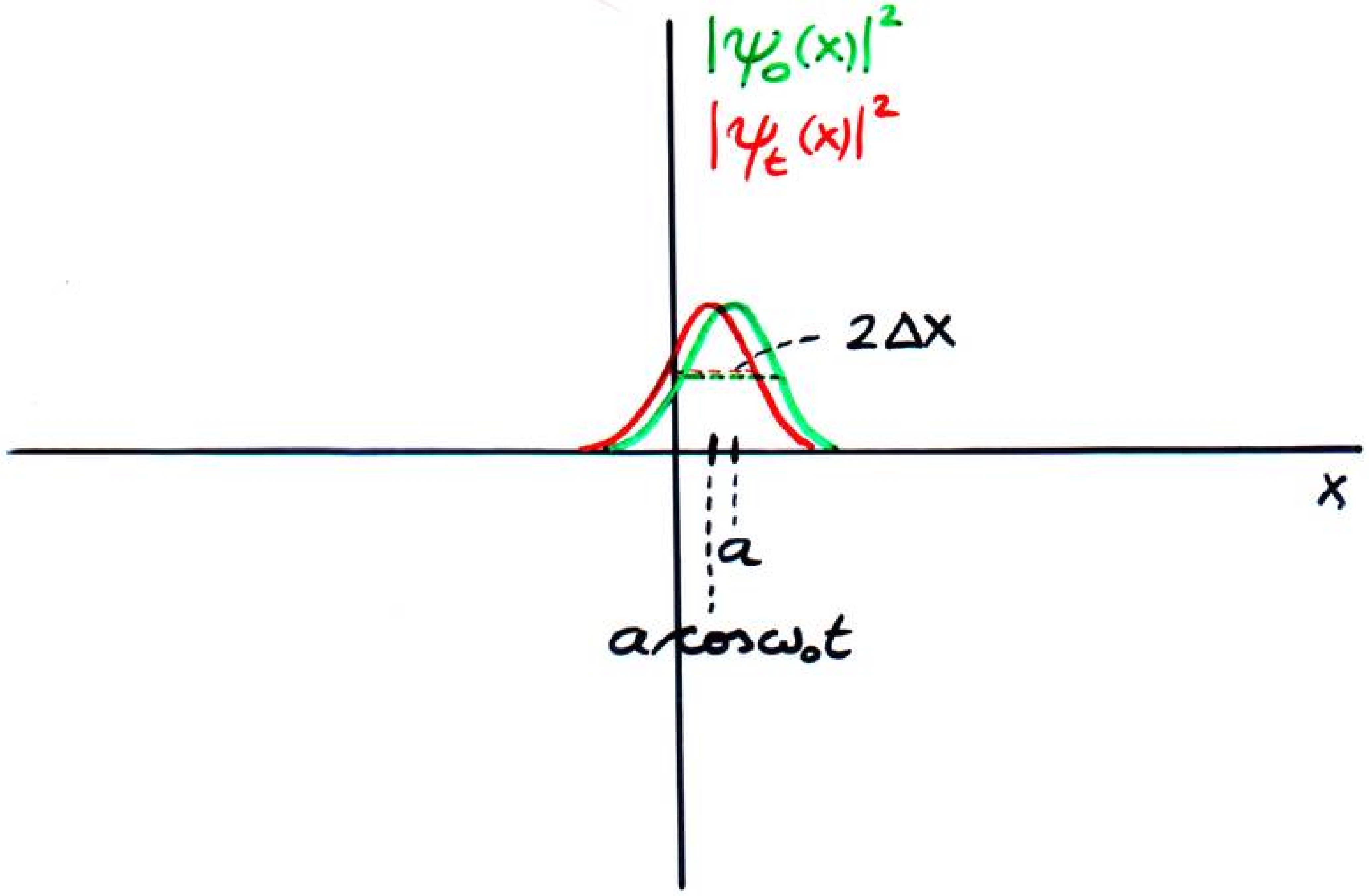
$$\Rightarrow \quad 2\Delta x \approx 10^{-8}\,cm = 1\,\text{Å} \approx a,$$

$$2\Delta p \approx 2\cdot 10^{-19}\,cm\,g\,s^{-1} \approx m\omega_0 a$$

$$V(a) \approx \hbar\omega_0 \approx 10^{-15}\,erg$$

n_0 Größenordnung 1

$$\langle \hat{H} \rangle \approx \Delta E \approx 10^{-15}\,erg$$



$2\Delta E \approx 2\hbar\omega_0$, d.h. in $\psi_t(x)$ tragen nur wenige Summanden mit kleinen n bei