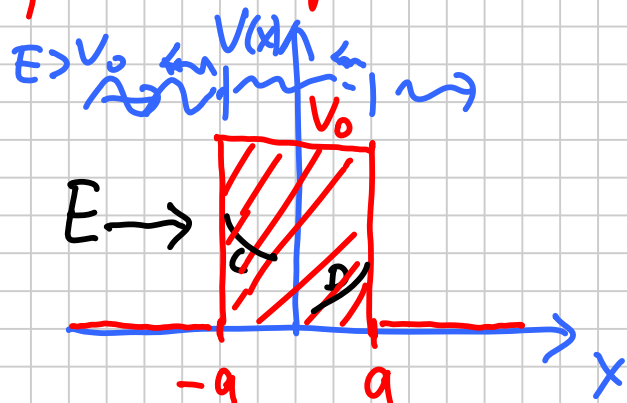


4.3 Potentialbarriere, Tunneleffekt.

$$V(x) = V_0 \theta(a - |x|)$$

$$0 < E < V_0$$



die allgemeinste Form der SG-Lösung!

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x < -a \\ C e^{-\alpha x} + D e^{\alpha x} & -a \leq x \leq a \\ F e^{ikx} + G e^{-ikx} & x > a \end{cases}$$

mit $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ und $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$

Konstanten A, B, C, D, F, G - von Stetigkeits- und

Anschlussbedingung bei $x = -a$

$$\psi \quad \int A e^{-ika} + B e^{ika} = C e^{\alpha a} + D e^{-\alpha a}$$

$$\psi' \quad ik(A e^{-ika} - B e^{ika}) = -\alpha(C e^{\alpha a} - D e^{-\alpha a})$$

In Matrixschreibweise:

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\alpha a} & e^{-\alpha a} \\ \frac{i\alpha}{k} e^{\alpha a} & -\frac{i\alpha}{k} e^{-\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

Lösung:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\alpha a} & e^{-\alpha a} \\ \frac{i\alpha}{k} e^{\alpha a} & -\frac{i\alpha}{k} e^{-\alpha a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} M(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

mit
$$\hat{M}(a) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 + \frac{i\varepsilon}{k}) e^{\alpha a + ika} & (1 - \frac{i\varepsilon}{k}) e^{-\alpha a + ika} \\ (1 - \frac{i\varepsilon}{k}) e^{\alpha a - ika} & (1 + \frac{i\varepsilon}{k}) e^{-\alpha a - ika} \end{pmatrix}$$

Anschlussbedingung bei $x = +a$

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \hat{M}(-a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

Für den Zusammenhang zwischen $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$ ergibt sich:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \hat{M}(a) \hat{M}^{-1}(-a) \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$

Dann:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\cosh 2\alpha a + \frac{i\varepsilon}{2} \sinh 2\alpha a) e^{2ika} & \frac{i\eta}{2} \sinh 2\alpha a \\ -\frac{i\eta}{2} \sinh 2\alpha a & (\cosh 2\alpha a - \frac{i\varepsilon}{2} \sinh 2\alpha a) e^{-2ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$

mit $\varepsilon = \frac{\alpha}{k} - \frac{k}{\alpha}$ und $\eta = \frac{\alpha}{k} + \frac{k}{\alpha}$

Für den Spezialfall – ein von links einfallendes Teilchen
($G = 0$)

$$A = F (\cosh 2\alpha a + \frac{i\varepsilon}{2} \sinh 2\alpha a) e^{2ika}$$

$$B = F (-\frac{i\eta}{2}) \sinh 2\alpha a$$

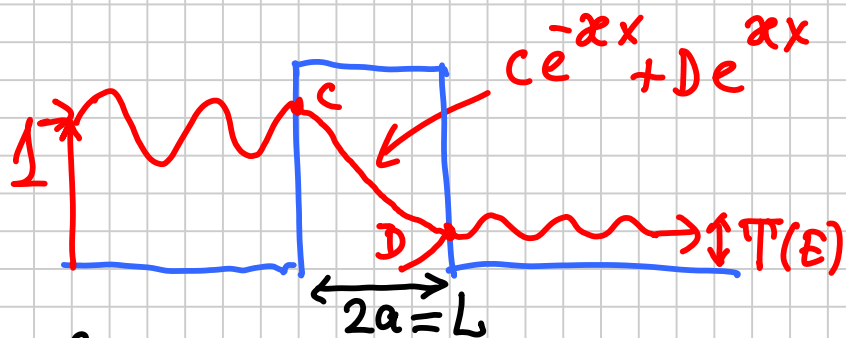
Transmissionsamplitude:

def
$$S(E) = \frac{F}{A} = \frac{e^{-2ika}}{\cosh 2\alpha a + \frac{i\varepsilon}{2} \sinh 2\alpha a}$$

Transmissionswahrscheinlichkeit

$$d) T(E) = |S(E)|^2 = \frac{1}{1 + (1 + \frac{E^2}{4}) \sinh^2(2\alpha a)} \equiv \left[1 + \frac{\sinh^2(2\alpha a)}{4 \frac{E}{V_0} (1 - \frac{E}{V_0})} \right]^{-1}$$

Tunneleffekt



Im Grenzfall:

einer sehr hohen und breiten Barriere:

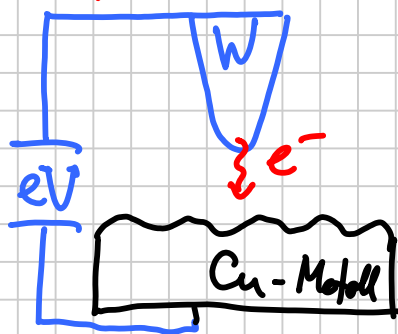
$$\alpha a \gg 1 \rightarrow \sinh(2\alpha a) \approx \frac{1}{2} e^{2\alpha a} \gg 1$$

$$T(E) \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-4\alpha a}$$

Tunnelwahrsch.

$$T(E) = 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) \exp\left\{-2 \sqrt{2m(V_0 - E)} \frac{L}{\hbar}\right\}$$

Exp. STM (RTM)

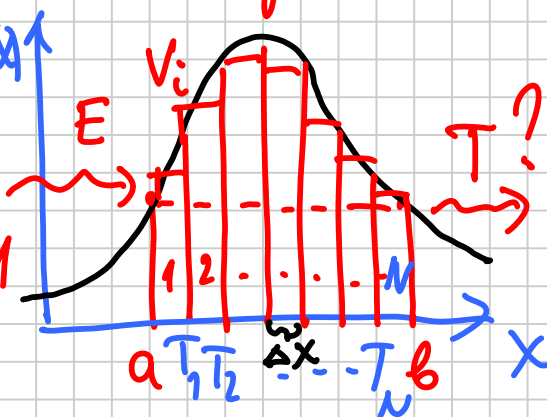


Kontinuierliche Potentialberge

$$T_i(E) = \exp\left[-\frac{2L}{\hbar} \sqrt{2m(V_i - E)} + \ln\left(\frac{16E(E - V_i)}{V_i^2}\right)\right]$$

$\ln \dots \ll 1$

$$T = T_1 \cdot T_2 \cdot T_3 \cdots T_N$$



$$T(E) = \prod_{i=1}^N \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_i - E)} \cdot \Delta x \right\} =$$

$$= \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \sum_{i=1}^N \sqrt{2m(V_i - E)} \Delta x \right\}$$

$$N \rightarrow \infty, \Delta x \rightarrow 0$$

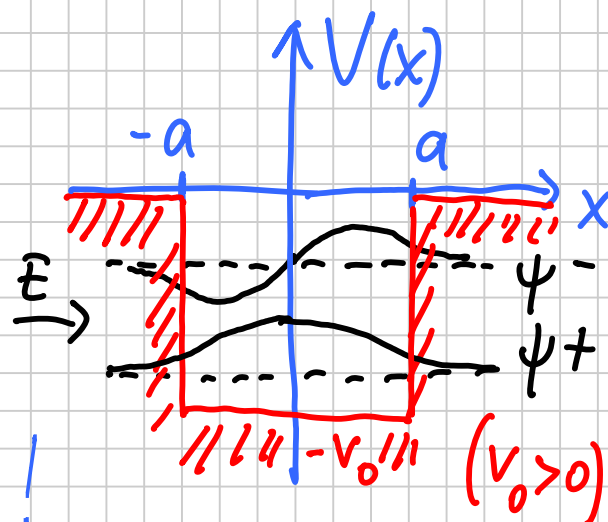
$$T(E) = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(V(x) - E)} dx \right\}$$

4.4 Potentialtopf

$$V(x) = -V_0 \Theta(a - |x|)$$

$$V(-x) = V(x) \quad \text{Paritätsinvariant!}$$

→ Eigenzustände = $\psi^\pm$ (g & u)



a) $-V_0 < E < 0$

$$\psi^{\{\pm\}}(x) = \begin{cases} A \begin{Bmatrix} \cos \\ \sin \end{Bmatrix}(kx) & , |x| \leq a \\ \begin{Bmatrix} + \\ - \end{Bmatrix} C e^{-\alpha|x|} & , |x| > a \end{cases}$$

Randbedingung bei $\pm a$:
Gerade Parität:
(g)

$$A \cos(ka) = C e^{-\alpha a}$$

$$-k A \sin(ka) = -\alpha C e^{-\alpha a}$$

$$\tan(ka) = \frac{\alpha}{k} \quad (g)$$

ψ
ψ'

Ungerade Parität

58

$$\begin{aligned} A \sin(ka) &= C e^{-\alpha a} \\ K A \cos(ka) &= -\alpha C e^{-\alpha a} \\ \cot(ka) &= -\frac{\alpha}{K} \end{aligned}$$

ψ
 ψ'

(u)

def:

$$K = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$$

$$-V_0 \leq E \leq 0$$

$\Downarrow$

$$\alpha = \sqrt{-2mE}/\hbar$$

$$\chi = a\sqrt{2mV_0}/\hbar \equiv \text{const} \quad 0 \leq ka \leq \chi$$

Lösung

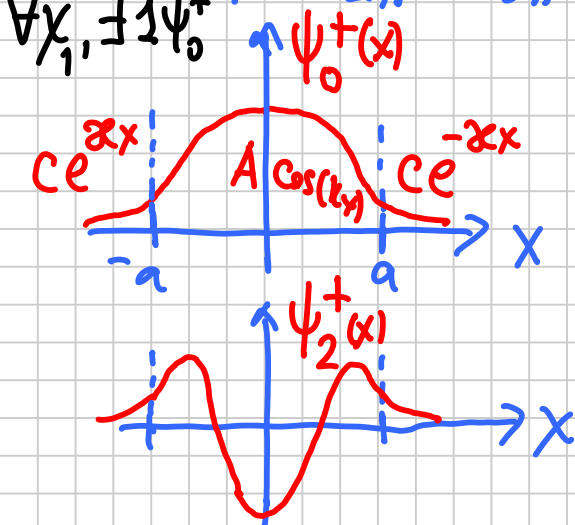
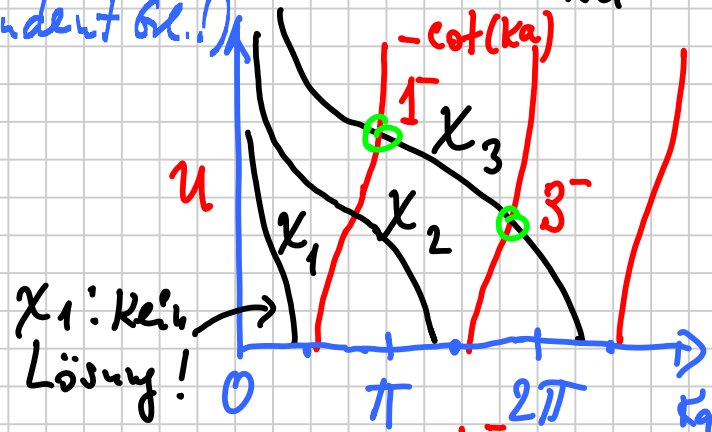
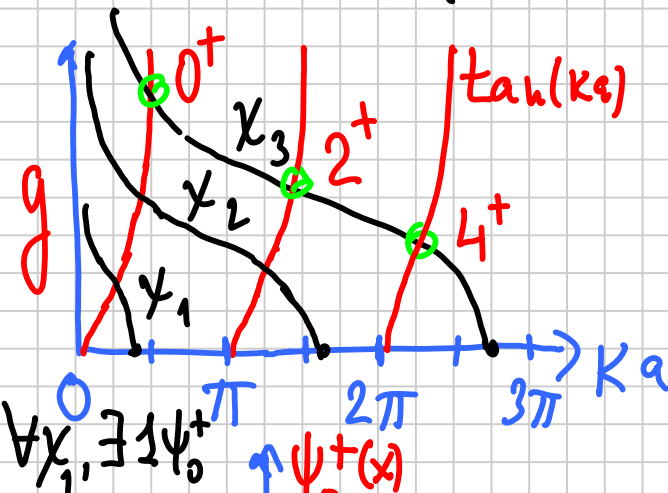
gerade

$$\tan(ka) = \frac{\sqrt{\chi^2 - (ka)^2}}{ka}$$

(Transzendent Gl.!) $\cdot$

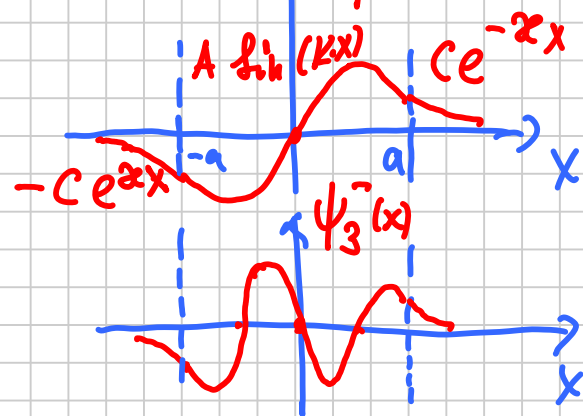
ungerade

$$-\cot(ka) = \frac{\sqrt{\chi^2 - (ka)^2}}{ka}$$



Energieeigenwerte

$$E_i = -V_0 + \frac{(k_i \hbar)^2}{2m}$$



$$\pi(n_g - 1) \leq \chi \leq \pi n_g$$

Zahl der Lösungen

$$\frac{\pi}{2}(2n_u - 1) \leq \chi \leq \frac{\pi}{2}(2n_u + 1)$$

$$n_g = \left[\frac{\chi}{\pi} \right] \leftarrow \text{nächstgrößte natürliche Zahl}$$

$$n_u = \left[\frac{\chi}{\pi} - \frac{1}{2} \right]$$

Im Grenzfall: $V_0 \rightarrow 0$ dann gibt es nur eine Lösung⁵⁹

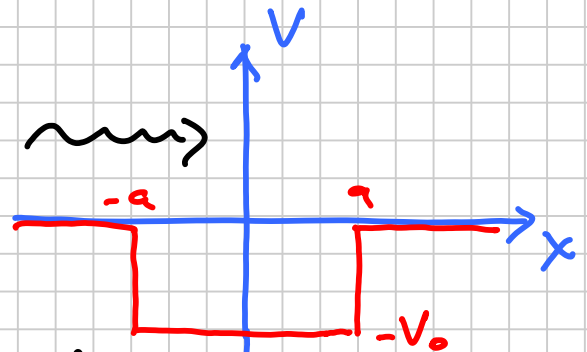
$$K = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar \rightarrow 0 \rightarrow \tan(Ka) \approx Ka$$

$$\rightarrow K^2 a = \infty \rightarrow 2m(E+V_0)/\hbar^2 a = \sqrt{-2mE}/\hbar$$

$$\rightarrow E_0 = -2mV_0^2 a^2/\hbar^2 \quad (V_0 \rightarrow 0) \quad \square$$

6) $E > 0$ **Resonanzen**

Untersuchen wir die Streuung eines von links einfallenden Teilchens:



Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{iK(x+a)} + B e^{-iK(x+a)} & , x < -a \\ C e^{iqx} + D e^{-iqx} & , -a \leq x \leq a \\ F e^{iK(x-a)} & , x > a \end{cases}$$

mit $K = \sqrt{2mE}/\hbar$ und $q = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$ (*)

Die Stetigkeitsbedingungen legen die Transmission fest:

$$S(E) = \frac{F}{A} = \frac{2Kq}{2Kq \cos(2qa) - i(K^2 + q^2) \sin(2qa)}$$

← ohne faktor: e^{-2iKa}

Transmissionswahrscheinlichkeit:

$$T(E) = |S(E)|^2 = \left[1 + \frac{\sin^2(2qa)}{4 \frac{E}{V_0} (1 + \frac{E}{V_0})} \right]^{-1}$$

$$0 \leq T \leq 1 \quad \text{und} \quad T(E) = 1 \quad \text{für} \quad \sin(2qa) = 0!$$

Resonanzen: $2qa = \pi n$, $n = 0, 1, 2, \dots$
 $\sin^2(2qa) = 0 \rightarrow \max T(E)$

min $T(E)$: $2qa = \frac{\pi}{2}(2n+1)$
 $\sin^2(2qa) = 1$

Wir betrachten $S(E)$ genauer in der Nähe einer Resonanz. Bei der Energie E_n^R können wir $S(E)$ ausdrücken als:

$$S(E) \approx \frac{1}{\cos(\pi n)} \frac{i\Gamma/2}{E - E_n + i\Gamma/2} \quad \text{-- "virtuell gebundener Zustand"}$$

wobei: $\frac{1}{\Gamma} = \frac{a}{2} \left[\frac{k^2 + q^2}{kq} \frac{dq}{dE} \right]_{E=E_n} = \frac{\chi}{4} \frac{1 + 2E_n/V_0}{\sqrt{E_n/V_0} (1 + E_n/V_0)}$

mit $\chi = a\sqrt{2mV_0}/\hbar$ - dimensionsloser Parameter.

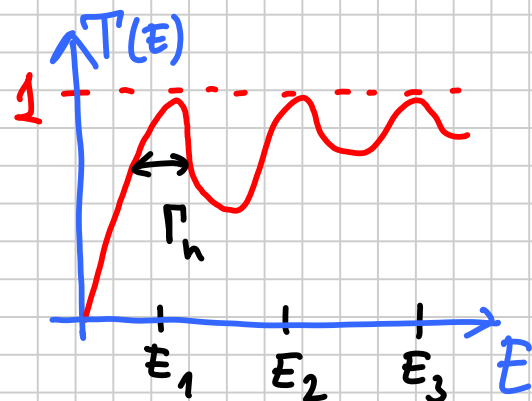
Die Phasenverschiebung: $\delta(E)$

def: $S(E) = \sqrt{T(E)} e^{i\delta(E)}$

dann:

$$\tan(\delta(E)) = \frac{1}{2} \left(\frac{k^2 + q^2}{kq} \right) \tan(2qa)$$

In der Nähe der Resonanz: $\tan(\delta(E)) \approx \frac{2}{\Gamma} (E - E_n)$

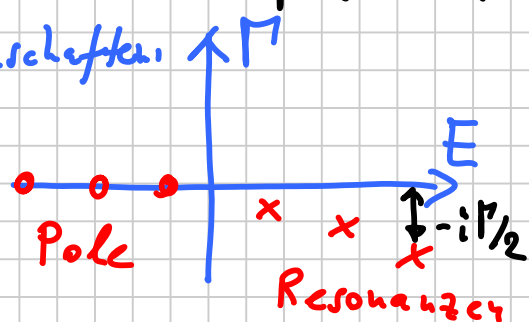


Analytische Eigenschaften:

$S(E)$:

$E < 0$ polstellen

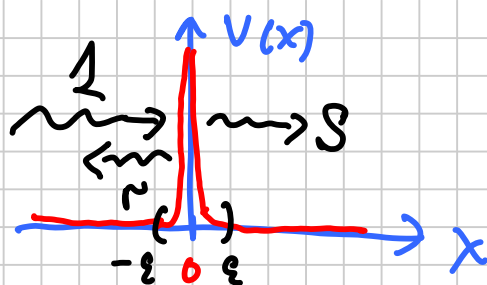
$E > 0$ Resonanzen



"Lebensdauer": $\Gamma_n = \hbar/\tau_n$

δ - Potential

$$V(x) = V_0 \delta(x)$$



Schrödinger-Gleichung:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + E \right) \psi(x) = V_0 \delta(x) \psi(x)$$

Wir integrieren auf beiden Seiten der SG von $-\epsilon$ bis $+\epsilon$ ($\epsilon > 0$) und lassen $\epsilon \rightarrow 0$!

$$(*) \quad \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=0_+} - \frac{d\psi(x)}{dx} \Big|_{x=0_-} \right) = V_0 \psi(0)$$

Ansatz:

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx} & , x < 0 \\ S(E) e^{ikx} & , x > 0 \end{cases}$$

wobei: $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, Randbedingungen: ψ und ψ' (*)

$$1 + r = S \quad \text{und} \quad -ik \frac{\hbar^2}{2} (1 - r - S) = 2m S V_0$$

$$\text{und: } S(E) = \frac{-ik \frac{\hbar^2}{2}}{m V_0 - ik \frac{\hbar^2}{2}} = \frac{-i \hbar \sqrt{2mE}}{m V_0 - i \hbar \sqrt{2mE}}$$

$$T(E) = |S(E)|^2 = \frac{2m E \hbar^2}{m^2 V_0^2 + 2m E \hbar^2}$$

- Transmissionskoeffizient

$$\delta(E) = \arctan \left(\frac{\hbar \sqrt{2mE}}{m V_0} \right)$$

- Phasenverschiebung

Es gibt keine Resonanzen für $V_0 > 0$ und $V_0 < 0$!

Für $V_0 < 0$ gibt es genau einen gebundenen Zustand

$$\psi(x) = A e^{-\alpha |x|}$$

$$\alpha = \sqrt{-2mE}/\hbar$$

von (*)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} 2\alpha A = V_0 A$$

$$\rightarrow E = -\frac{m V_0^2}{2\hbar^2}$$

- Knotenfreie Wellenfunktion, gerader Parität.

4.5 Periodische Potentiale

62

Elektronen in einem "Festkörper".

Eigenschaften:

$$V(x) = V(x + na)$$

a - "Gitterkonstante"

Wir können hier einen Translationsoperator $\hat{T}_a$ definieren:

$$\hat{T}_a |x\rangle = |x-a\rangle$$

$$\text{und } \langle x | \hat{T}_a = \langle x+a |$$

Es gilt dann:

$$\begin{aligned} \hat{T}_a |p\rangle &= \int dx |x\rangle \langle x+a | p \rangle = \int dx e^{ip(x+a)/\hbar} |x\rangle \\ &= e^{ipa/\hbar} \int dx |x\rangle \langle x | p \rangle = e^{ipa/\hbar} |p\rangle \end{aligned}$$

Offenbar gilt: $\hat{T}_a = e^{i\hat{p}a/\hbar}$

und: $\hat{T}_a^{-1} = \hat{T}_a^\dagger$

- Translationsoperator

eine Unitäre Transformation

Der Hamilton Operator: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ ist invariant

unter solchen Translationen, so dass:

$$[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$$

Folglich haben $\hat{H}$ und $\hat{T}_a$ gemeinsame

Eigenzustände:

$$\hat{T}_a |\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle$$

wofür gilt:

$$\langle x | \hat{T}_a^n |\psi_\lambda\rangle = \langle x+na | \psi_\lambda \rangle = \lambda^n \langle x | \psi_\lambda \rangle$$

dann $|\lambda| = 1$ (sonst $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \begin{cases} 0, & |\lambda| < 1 \\ \infty, & |\lambda| > 1 \end{cases}$)

(unitär)

also

$$\lambda = e^{ik a}$$

mit k - reeller Parameter

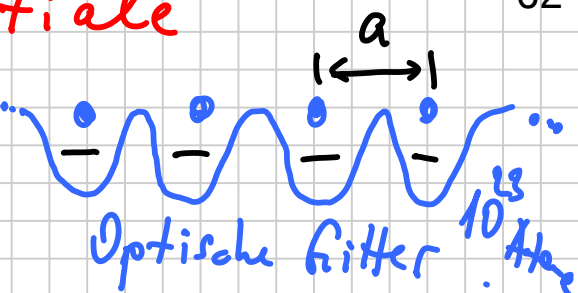
Wellenfunktion:

mit

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$$

$$u_k(x+a) = u_k(x)$$

Bloch-Theorem



Die SG für Bloch-Wellenfunktion $u_k(x)$: 63

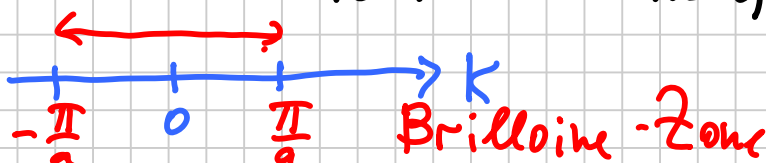
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dx^2} + 2ik \frac{d}{dx} - k^2 + V(x) \right] u_k(x) = E_k u_k(x)$$

Parameter k - ein Pseudo-Impuls:

Es gilt: $\lambda = e^{ika} = e^{i(k+Q)a}$ mit $Q = \frac{2\pi}{a}n$
 $n = 0, \pm 1, \pm 2$

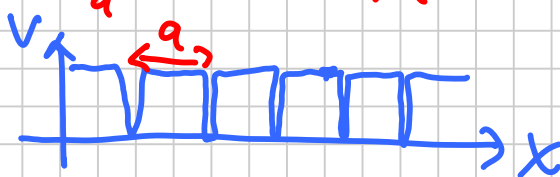
→ k nur auf endlichen Bereich:

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$$



Kronig-Penney Model:

$$V(x) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-na)$$



für $E > 0$: $\psi(x) = A e^{iqx} + B e^{-iqx}$ ($V(x) = 0$, zwischen $x=na$ und $x=(n+1)a$)

Bloch-Wellenfunktion: $u_k(x) = A e^{i(q-k)x} + B e^{-i(q+k)x} \equiv e^{-ikx} \psi_k(q)$

mit Bedingung: $u_k(x+a) = u_k(x)$ und $u_k(na+\epsilon) - u_k(na-\epsilon) \rightarrow 0$ für $\epsilon \rightarrow 0$

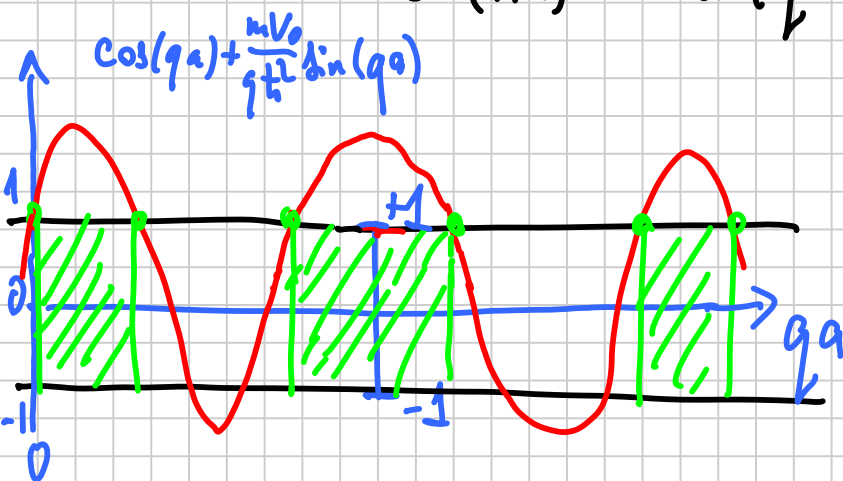
Randbedingungen:

$$A e^{i(q-k)a} + B e^{-i(q+k)a} = A + B$$

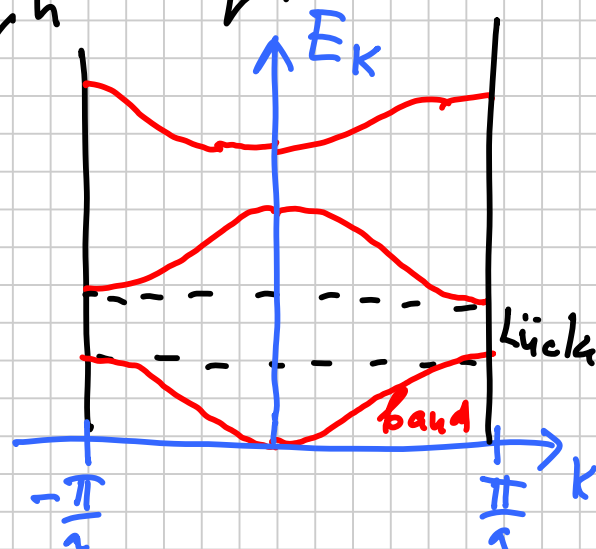
$$iq(A - B - A e^{i(q-k)a} + B e^{-i(q+k)a}) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} (A + B)$$

Dieses Gleichungssystem hat nur für bestimmte Werte von q und k eine Lösung, woraus die Eigenwertgleichung resultiert:

$$\cos(ka) = \cos(qa) + \frac{mV_0}{q\hbar^2} \sin(qa)$$

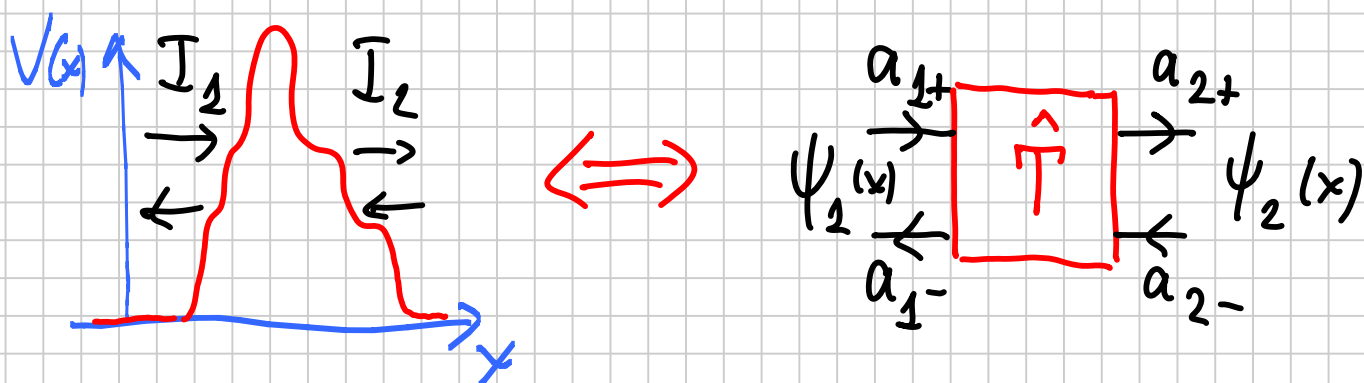


Lösung ($|\cos(ka)| \leq 1$)



Bändern von Zuständen.

4.6 Transfer-Matrix (1d)



Wellenfunktion:

$$\psi_1(x) = a_{1+} e^{ikx} + a_{1-} e^{-ikx} \quad \text{und} \quad \psi_2(x) = a_{2+} e^{ikx} + a_{2-} e^{-ikx}$$

def: Vektor $\vec{a}_i = (a_{i+}, a_{i-})$, $i = (1, 2)$

Lineare Beziehung: (aus dem Superpositionsprinzip)

$$\vec{a}_2 = \hat{T} \vec{a}_1, \quad \text{mit} \quad \hat{T} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}$$

Die Stromerhaltung: $j_1 = j_2 \Rightarrow \det \hat{T} = 1$

$V(x)$ - reell $\Rightarrow \psi$ und ψ^* - Lösungen von S.G. $\Rightarrow$

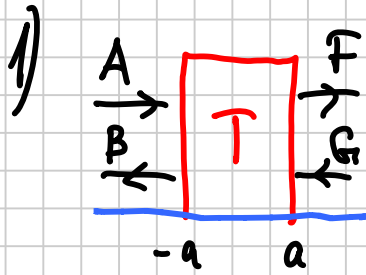
$$T_{22} = T_{11}^* \quad \text{und} \quad T_{12} = T_{21}^*$$

d.h.

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{12}^* & T_{11}^* \end{pmatrix}$$

Transfermatrix

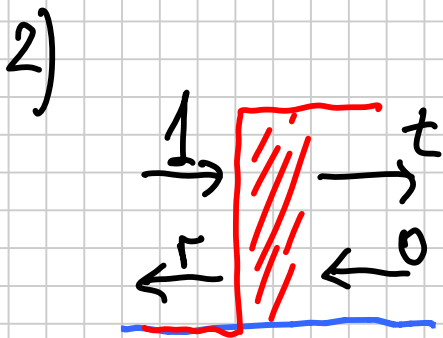
Beispiele:



$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} (\alpha - i\beta) e^{-2ika} & i\eta/2 \sinh 2a \\ -i\eta/2 \sinh 2a & (\alpha + i\beta) e^{2ika} \end{pmatrix}$$

mit $\alpha = \cosh 2\kappa a$
 $\beta = \frac{e}{2} \sinh 2\kappa a$



$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}$$

mit $\hat{T} = \begin{pmatrix} 1/t^* & -r^*/t^* \\ -r/t & 1/t \end{pmatrix}$

$$1 = |t|^2 + |r|^2 \rightarrow \det \hat{T} = \frac{1}{|t|^2} - \frac{|r|^2}{|t|^2} = \frac{1 - |r|^2}{|t|^2} = 1$$

Wir betrachten zwei räumlich separierte

Streuungspotentiale: $T_1 \equiv (t_1, r_1)$ und $T_2 \equiv (t_2, r_2)$



$$\hat{T} = \hat{T}_1 \cdot \hat{T}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{t_1^* t_2^*} + \frac{r_1^* r_2}{t_1^* t_2}, & -\frac{r_2^*}{t_1^* t_2^*} - \frac{r_1^*}{t_1^* t_2} \\ -\frac{r_1}{t_1 t_2^*} - \frac{r_2}{t_1 t_2}, & \frac{1}{t_1 t_2} + \frac{r_1 r_2^*}{t_1 t_2^*} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \frac{1}{t^*}, & -\frac{r^*}{t^*} \\ -\frac{r}{t}, & \frac{1}{t} \end{pmatrix}$$

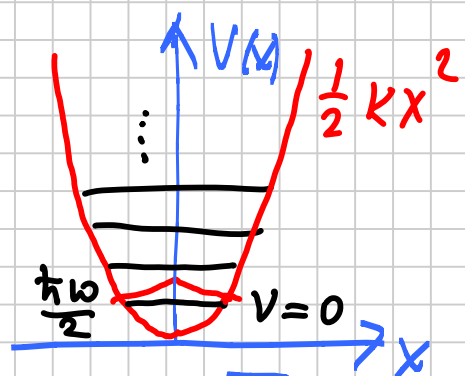
Verhältnis zwischen Γ und t !

$$\frac{|\Gamma|^2}{|t|^2} = \frac{1}{|t|^2} - 1 = \frac{1}{|t_1|^2 |t_2|^2} \left| 1 + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^* t_2}{t_2^*} \right|^2 - 1 =$$

$$= \frac{1}{|t_1|^2 |t_2|^2} \left(1 + |\Gamma_1|^2 |\Gamma_2|^2 + \frac{\Gamma_1 \Gamma_2^* t_2}{t_2^*} + \frac{\Gamma_1^* \Gamma_2 t_2^*}{t_1} \right) - 1$$

4.7 Der harmonische Oszillator

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



neue Operatoren:

$$\begin{cases} \hat{a} = \frac{m\omega \hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right) \\ \hat{a}^\dagger = \frac{m\omega \hat{x} - i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right) \end{cases}$$

$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$
 $k = m\omega^2$
 $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

a - nicht hermitescher Operator!

Diese Transformation kann invertiert werden:

$$\begin{cases} \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \\ \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \end{cases} \quad (*)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \Rightarrow [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}, \hat{a}] = 0 \text{ Bosonen}$$

Hamilton operator (*)

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$$

beweis: $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1$

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{i}{2\hbar} (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$$

def: $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$ - Besetzungszahl-operator

$\hat{n}$ - hermitesch: $\hat{n}^\dagger = (\hat{a}^\dagger \hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{n}$

Eigenzustände von $\hat{n}$:

$$\hat{n} |\psi_v\rangle = v |\psi_v\rangle$$

wobei gilt: $v = \langle \psi_v | \hat{n} | \psi_v \rangle = \langle \alpha_v | \alpha_v \rangle \geq 0$

mit: $|\alpha_v\rangle = \hat{a} |\psi_v\rangle$

Damit ist der niedrigst mögliche Eigenwert: $v = 0$

Die Grundzustandsenergie:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Wellenfunktion: $|\alpha_0\rangle = \hat{a} |\psi_0\rangle = 0$ Nullvektor

$$0 = \langle x | \hat{a} | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right) \langle x | \psi_0 \rangle$$

mit $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ - charakteristische Länge $\psi_0(x)$

Lösung

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi}}} e^{-x^2 / 2x_0^2}$$

$|0\rangle =$
- Gauß'sche Funktion

Die Eigenzustände höherer Energie finden wir mit Hilfe:

$$[\hat{n}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger, \quad [\hat{n}, \hat{a}] = -\hat{a}$$

Bew: $\hat{n} \hat{a} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} = (\hat{a} \hat{a}^\dagger - 1) \hat{a} = \hat{a} (\hat{n} - 1)$

Daraus folgt:

$$\hat{n} \hat{a}^\dagger |\psi_v\rangle = \hat{a}^\dagger (\hat{n} + 1) |\psi_v\rangle = (v+1) \hat{a}^\dagger |\psi_v\rangle \equiv (v+1) N |\psi_{v+1}\rangle$$

N - normierungsfaktor

$$N^2 = \langle \psi_v | \hat{a} \hat{a}^\dagger | \psi_v \rangle = N^2 \underbrace{\langle \psi_{v+1} | \psi_{v+1} \rangle}_{=1} = \langle \psi_v | \hat{n} + 1 | \psi_v \rangle = v+1$$

$$\rightarrow |\psi_{v+1}\rangle = \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{v+1}} |\psi_v\rangle, \quad \text{oder}$$

$$\hat{a}^\dagger |\psi_v\rangle = \sqrt{v+1} |\psi_{v+1}\rangle$$

$$\langle \psi_v | \psi_v \rangle = 1 \Rightarrow N = \sqrt{v+1}$$

Umgekehrt:

$$\hat{a} |\psi_v\rangle = \sqrt{v} |\psi_{v-1}\rangle$$

Bew: $\hat{n} \hat{a} |\psi_v\rangle = \hat{a} (\hat{n} - 1) |\psi_v\rangle = (v-1) \hat{a} |\psi_v\rangle \equiv (v-1) N |\psi_{v-1}\rangle$

$$N^2 = N^2 \underbrace{\langle \psi_{v-1} | \psi_{v-1} \rangle}_{=1} = \langle \psi_v | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \psi_v \rangle = v \langle \psi_v | \psi_v \rangle = v$$

V - ganzzahlig.

Wenn es Eigenwert (V) gäbe mit $0 < V < 1$, dann:
 $V-1 < 0$
 - negativ eigenwert!

$$\hat{n} |\psi_{V-1}\rangle = (V-1) |\psi_{V-1}\rangle$$

$$\hat{n} |n\rangle = n |n\rangle$$

mit $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$

$$\begin{cases} \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \\ \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \end{cases}$$

- Absteigeoperator
 - Aufsteigeoperator

Wellenfunktion $|n\rangle$:

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^\dagger |\psi_{n-1}\rangle = \dots = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |\psi_0\rangle$$

mit Energie $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$

Ans:

$$\begin{aligned} \langle x | \psi_n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x | (\hat{a}^\dagger)^n | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx} \right)^n \underbrace{\langle x | \psi_0 \rangle}_{\psi_0(x)} \\ &= \frac{e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}}{(2^n \cdot n! \cdot x_0 \sqrt{\pi})^{\frac{1}{2}}} H_n \left(\frac{x}{x_0} \right) \end{aligned}$$

$H_n(x)$ - Hermite - Polynome

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

Bew: ($x_0 \rightarrow 1$)

$$\begin{aligned} H_n(x) &= e^{\frac{x^2}{2}} (\sqrt{2} \hat{a}^\dagger)^n e^{-\frac{x^2}{2}} \\ &= e^{x^2} \underbrace{e^{-\frac{x^2}{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right)^n e^{\frac{x^2}{2}}}_{\text{Hermite-Polynom}} e^{-x^2} \end{aligned}$$

Operatoridentität:

$$e^{-x^2/2} \left(x - \frac{d}{dx} \right) e^{x^2/2} \equiv -\frac{d}{dx}$$

und $e^{-x^2/2} \left(x - \frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2/2} = (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} \Rightarrow H_n(x)!$

Orthogonalität:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm}$$

$$\Rightarrow \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$$

Erzeugende Funktion:

$$e^{-t^2/2 + 2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n H_n(x)$$

Differentialgleichung:

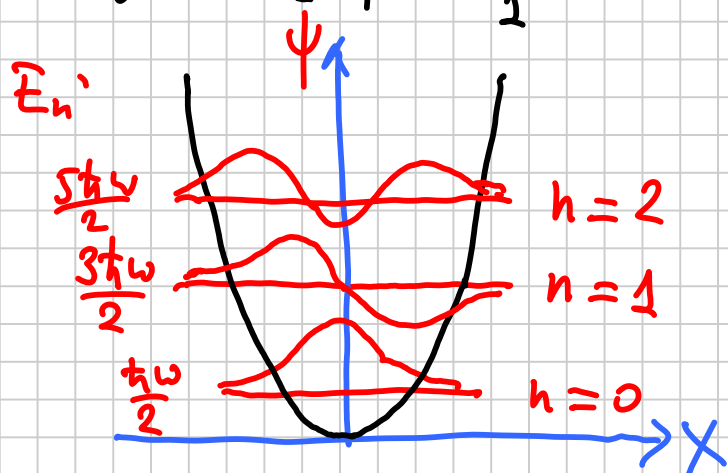
$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + 2n \right] H_n(x) = 0$$

Vollständigkeit:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x) \psi_n(x') = \delta(x-x')$$

$|\psi_n\rangle$ mit $n=0, 1, 2, \dots, \infty$ - VONS

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_3(x) = 4x^2 - 2, \dots$$



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

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$$

$$\left(\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \right)$$

Kohärente Zustände: ($\hat{a}$)

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

mit α - eine komplexe Zahl: $\alpha = |\alpha|e^{i\delta}$

VONS $|\psi_n\rangle \equiv |n\rangle$

$$|\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\alpha\rangle$$

mit

$$\langle n|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \underbrace{\langle 0|\hat{a}^n}_{\langle n|} |\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \underbrace{\langle 0|\alpha\rangle}_{c}$$

Daraus folgt:

$$|\alpha\rangle = c \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = c \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha \hat{a}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = c e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle$$

Normierung c:

$$1 = \langle \alpha|\alpha\rangle = c^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = c^2 e^{|\alpha|^2}$$

$$\Rightarrow c = e^{-|\alpha|^2/2}$$

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

- Kohärenter Zustand

- ist nicht mehr ein Eigenzustand des sondern eine kohärente Überlagerung vieler Zustände mit verschiedenen Eigenwerten von $\hat{n}$.

Mittelwert von $\hat{n}$:

$$\langle \hat{n} \rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n |\alpha|^{2n}}{n!} = |\alpha|^2$$

Abweichung:

$$\langle (\hat{n} - \langle \hat{n} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{n}^2 \rangle - \langle \hat{n} \rangle^2 = |\alpha|^2$$

mittlere Energie:

$$\langle E \rangle = \hbar \omega |\alpha|^2$$

Abweichung ΔE :

$$\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = \hbar \omega |\alpha|$$

Das zeitliche Verhalten:

$$|n(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |0\rangle = e^{-i\omega t(n+\frac{1}{2})} |0\rangle$$

woraus folgt:

$$|\alpha(t)\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle e^{-i\omega t/2}$$

$$= e^{-i\omega t/2} |\psi_{\alpha(t)}\rangle$$

mit $\alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}$

Erwartungswert von $\hat{x}$:

($\alpha = |\alpha| e^{i\delta}$)

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}(t) \rangle &= \langle \alpha(t) | \hat{x} | \alpha(t) \rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \langle \alpha(t) | \hat{a}^\dagger + \hat{a} | \alpha(t) \rangle = \\ &= \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\alpha^*(t) + \alpha(t)) = \sqrt{2} x_0 |\alpha| \cos(\omega t - \delta) \end{aligned}$$

• wie eine klassische Schwingung (Ehrenfest)