§3. Einfache, wellenmechanische Systeme.

1. Der harmonische Oszillator (Anhang B)

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2 , \qquad p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

Zeitabh. Schrödingergl.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \psi \qquad (1)$$

Stationäre Lösungen:

$$\psi(x,t) = u(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \qquad (2)$$

$$\Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 u = E u \qquad (3)$$

Reskalierte, dimensionslose Variablen:

$$E =: \hbar\omega\varepsilon , \qquad \xi := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x \qquad (4)$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{-u'' + \xi^2 u = 2\varepsilon u} \qquad (5)$$

Asymptotische Gl. für $|\xi| \to \infty$:

$$-u''_\infty + \xi^2 u_\infty = 0$$

Lösung: $u_\infty(\xi) = e^{\pm \frac{1}{2}\xi^2}$

Schrödinger'sche Randbedg.: u (polynomial) beschränkt! $\Rightarrow$ $u_\infty(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ (6)

Ansatz für allg. Lösung von (5):

$$u(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi^2} w(\xi) \qquad (7)$$

$$\Rightarrow \boxed{\frac{d^2 w}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dw}{d\xi} + (2\varepsilon - 1) w = 0} \qquad (8)$$

Potenzreihenansatz für w:

$$w(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$$

$\Rightarrow$ Erhalten aus (8) Rekursionsformeln für die a_k:

$$\boxed{a_{k+2} = \frac{2k - (2\varepsilon - 1)}{(k+2)(k+1)} a_k , \quad k = 0, 1, 2, \dots} \qquad (9)$$

Aus Annahme $a_k \neq 0$, für k beliebig gross,

folgt

$$a_{k+2} \underset{k\to\infty}{\sim} \frac{2}{k} a_k \qquad (10)$$

$$\Rightarrow w(\xi) \underset{\xi\to\infty}{\sim} \sum_k \frac{1}{k!} \xi^{2k} \sim e^{\xi^2} \qquad (11)$$

$$\Rightarrow u(\xi) \sim e^{\xi^2/2}, \text{ für } |\xi| \to \infty.$$

Dies verletzt Schrödinger'sche Randbedg. !

$$\Longrightarrow \boxed{a_k = 0, \text{ für } k \text{ gross}} \qquad (12)$$

Mit (9) folgt, dass (12) erfüllt dann und nur dann

wenn

$$\boxed{\varepsilon = n + \frac{1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \cdots} \qquad (13)$$

Für n gerade, $a_0, a_2, \cdots, a_n \neq 0$; $a_{2l+1} = 0, \forall l$

Für n ungerade, $a_1, a_3, \cdots, a_n \neq 0$; $a_{2l} = 0, \forall l$.

Für $\varepsilon = \varepsilon_n := n + \frac{1}{2}$, ist $w(\xi)$ ein Polynom n^{ten} Grades mit Parität $(-1)^n$; n^{tes} Hermite Polynom, H_n.

Dgl. für H_n ist

$$\boxed{H_n'' - 2\xi H_n + 2n H_n = 0} \qquad (14)$$

Wir definieren die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatore

$$a^* := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) \qquad \left(= \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip)\right)$$

$$a := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)$$

Falls f zweimal stetig diff. bar, dann

$$\left.\begin{aligned} 2a^*a f &= -\frac{d^2}{d\xi^2} f + \xi^2 f - f \\ 2aa^* f &= -\frac{d^2}{d\xi^2} f + \xi^2 f + f \end{aligned}\right\} \qquad (15)$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{aa^* - a^*a \equiv [a, a^*] = 1} \qquad (16)$$

Mit Hilfe von a, a^*, können H wie folgt umschreiben:

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

und die Eigenwertgl. (5) wird

$$\boxed{\frac{1}{\hbar\omega}\left(H - \frac{1}{2}\hbar\omega\right)u = a^*a\, u = \left(\varepsilon - \frac{1}{2}\right)u} \qquad (17)$$

Für $\varepsilon = \varepsilon_n = n + \frac{1}{2}$, $u = u_n = H_n\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$, gilt

$$a^* a\, u_n = n\, u_n$$

<u>Lemma.</u> $u_{n+1} \propto a^* u_n$

<u>Beweis.</u> Mit (16) gilt

$$a^* a\,(a^* u_n) = a^*\,(a^* a + 1)\, u_n = (n+1)\, a^* u_n .$$

Falls $a^* u_n \neq 0 \Rightarrow a^* u_n \propto u_{n+1}$.

Sei

$$\langle f, g \rangle := \int d\xi\, \overline{f(\xi)}\, g(\xi)$$

das Skalarprodukt auf $L^2(\mathbb{R}, d\xi)$. Dann gilt

$$\langle a^* u_n, a^* u_n \rangle \underset{\substack{\uparrow \\ \text{partielle Integration}}}{=} \langle u_n, a\, a^* u_n \rangle$$

$$\overset{(16)}{=} \langle u_n, (a^* a + 1)\, u_n \rangle$$

$$= (n+1)\, \langle u_n, u_n \rangle \neq 0. \qquad (18)$$

$$\Rightarrow \quad a^* u_n \neq 0$$

Q.E.D.

Normierung der Eigenfunktionen u_n:

$$\overline{u_n} = u_n \,, \text{ und } \quad \|u_n\|_2 := \sqrt{\langle u_n, u_n\rangle} = 1.$$

Gl. für u_0: $\quad a^* a u_0 = 0$

Falls $au_0 \neq 0$, dann $a^*(au_0) \neq 0 \Rightarrow au_0 = 0$, d.h.

$$\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) u_0 = 0$$

$$\Rightarrow \quad u_0 = c\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

$$\|u_0\|_2 = 1 \Longrightarrow \quad c = \pi^{-1/4}. \tag{19}$$

Wegen Lemma und (18)

$$u_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\, a^* u_n \tag{20}$$

$$(19) \,\&\, (20) \Rightarrow \boxed{u_n = \pi^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^*)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2}} \tag{21}$$

Da $\quad a^* = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)$, haben wir, dass

$$a^* = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{\xi^2/2}\left(-\frac{d}{d\xi}\right) e^{-\xi^2/2}, \tag{22}$$

als Operatorgl.. Daher folgt aus (21) und (22):

$$u_n(\xi) = \pi^{-1/4}\, 2^{-\frac{n}{2}} \frac{1}{\sqrt{n!}}\, e^{\xi^2/2}\left(-\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2} \tag{23}$$

oder

$$u_n(\zeta) = \pi^{-1/4}\, 2^{-\frac{n}{2}}\, \frac{1}{\sqrt{n!}}\, e^{-\zeta^2/2}\, H_n(\zeta),$$

wo

$$H_n(\zeta) := e^{\zeta^2}\left(-\frac{d}{d\zeta}\right)^n e^{-\zeta^2}. \qquad (24)$$

Mit Satz von Cauchy, d. h.

$$f^{(n)}(z) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_\Gamma \frac{f(\xi)}{(\xi - z)^{n+1}}\, d\xi, \quad (\Gamma \text{ umschliesst } z),$$

folgt

$$H_n(\zeta) = e^{\zeta^2} (-1)^n \frac{n!}{2\pi i} \oint_\Gamma \frac{e^{-\xi^2}}{(\xi - \zeta)^{n+1}}\, d\xi \qquad (25)$$

Erzeugende Funktion der Hermite Polynome:

$$\Phi(\zeta, t) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(\zeta) \qquad (26)$$

(25) & (26) $\Rightarrow$

$$\Phi(\zeta, t) = \frac{1}{2\pi i} \oint_\Gamma e^{\zeta^2 - \xi^2} \frac{1}{\xi - \zeta} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-t}{\xi - \zeta} \right)^n \right) d\xi$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \int_\Gamma e^{\zeta^2 - \xi^2} \frac{d\xi}{\xi - (\zeta - t)} = e^{\xi^2 - (\zeta - t)^2}. \qquad (27$$

Lemma. $\langle u_m, u_n \rangle = \delta_{mn}$.

Beweis. $\langle u_n, u_n \rangle = 1, \ \forall n$, nach Konstruktion

Wegen (17) gilt für $n \neq 0$, m beliebig:

$$\langle u_m, u_n \rangle = \frac{1}{n} \langle u_m, a^* a \, u_n \rangle$$

$$\overset{\text{2x part. Integrat.}}{=} \frac{1}{n} \langle a^* a \, u_m, u_n \rangle$$

$$\overset{(17)}{=} \frac{m}{n} \langle u_m, u_n \rangle$$

$\Rightarrow \langle u_m, u_n \rangle = 0$ für $m \neq n$. Q.E.D.

Sei $L^2(\mathbb{R}, d\xi)$ der Hilbertraum der quadratintegrablen Funktionen auf $\mathbb{R}$, mit Skalarprodukt $\langle \cdot , \cdot \rangle$.

Satz. $\{u_n\}_{n=0}^{\infty}$ ist ein VONS (insb. eine Basis) in $L^2(\mathbb{R}, d\xi)$.

Beweis. 1° Mit Satz von Weierstrass!

2° Mit Fouriertransformation:

$$F(z) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-izx - \frac{x^2}{2}\right) \overline{f(x)} \, dx$$

F ist F.T. von $\exp(-\frac{x^2}{2}) \, \overline{f(x)}$

Für $f \in L^2(\mathbb{R}, dx)$ ist F eine ganze Funktion von z.

$$F^{(n)}(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (-i)^n \int_{\mathbb{R}} x^n \, e^{-izx - x^2/2} \, \overline{f(x)} \, dx \qquad (28)$$

Sei nun $\langle f, u_n \rangle = 0, \ \forall n = 0, 1, 2, \ldots$

$\Rightarrow \quad F^{(n)}(0) = 0, \ \forall n,$ wegen (23).

$\Rightarrow \quad F(z) = 0, \ \forall z$

$\Rightarrow \quad \displaystyle\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-izx} \left(e^{-x^2/2} \, \overline{f(x)} \right) dx = 0, \ \forall z$

$\Rightarrow \quad e^{-x^2/2} \, \overline{f(x)} = 0,$ f. ü. $\Rightarrow$ $f(x) = 0$, f. ü.

$$\Rightarrow \boxed{f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(\xi), \quad \text{f. ü.,}}$$

wo $c_n := \langle f, u_n \rangle$ (wegen Orthonormalität der Fu. u_n!) (2

Sei $f = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n$, $g = \sum_{n=0}^{\infty} d_n u_n$. Dann gilt:

$$\boxed{\langle f, g \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n d_n} \quad \text{(Parseval)}$$

Vorlesung vom Dienstag, dem 3. Dez. 1991

① Erzeugende Fn. der Hermite Polynome:

Skript. S. 7

② Nullstellen von $u_n = H_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$:

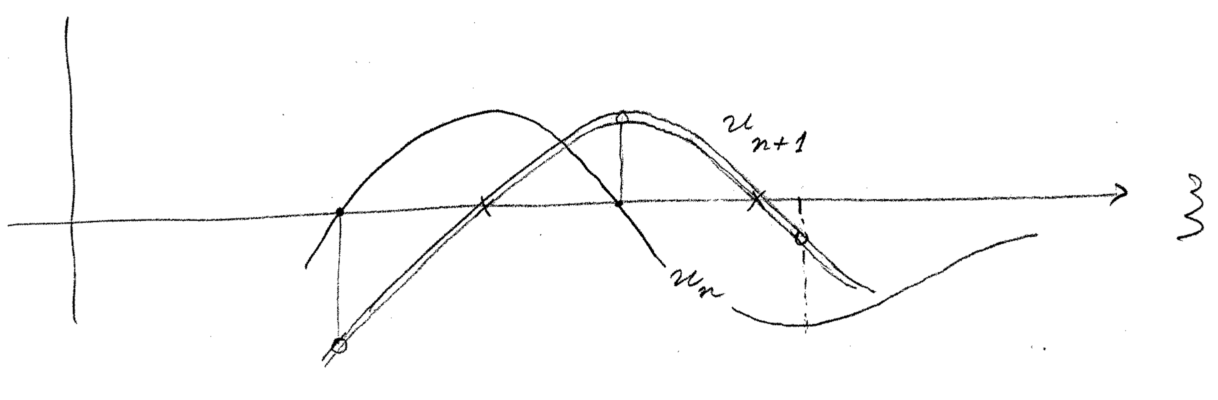
(1) $u_0(\xi) > 0$, $\forall \xi$.

(2) Mit Induktion: ψ_n hat n Nullstellen.

$$u_{n+1}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) u_n(\xi)$$

$\Rightarrow$ $u_{n+1}(\xi)$ wechselt Vorzeichen zwischen 2

benachbarten Nullstellen von $u_n(\xi)$:



$\Rightarrow$ Zwischen 2 Nullstellen von u_n $\exists$ eine Nullstelle

von u_{n+1}; nach letzter (& vor erster) Nullstelle von

u_n $\exists$ Nullstelle von u_{n+1} $\Longrightarrow$ u_{n+1} hat $n+1$ Nullstellen.

Damit ist (2) bewiesen!

(3) Die $\{u_n\}$ bilden ein VONS in $L^2(\mathbb{R}, d\xi)$:

S. 8, 9.

(4.) Lösung der zeitabh. Schrödinger Gl.:

S. 10.

Allgemeine Lösung der zeitabh. Schrödingergl.

$$\psi(x,0) = \psi_0(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x),$$

für $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R}, dx)$. Dann ist

$$\left.\begin{aligned} \psi(x,t) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} u_n(x), \\ E_n &= \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right) \end{aligned}\right\} \quad (30)$$

die allgemeine Lösung der zeitabh. Schrödingergl.

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad : \text{Nullpunktsenergie.}$$

<u>Exp. Verfikation:</u> <u>Casimir Effekt</u>, Festkörperphysik

<u>Übung:</u> 1) Herleitung der Planck'schen Strahlungsformel aus QM des harmonischen Oszillators.

2) Casimir Effekt.

Eine Anwendung der Quantenmechanik harmonischer Oszillatoren: Der Debye-Waller Faktor.

Betrachten einen in ein Kristallgitter eingebauten (angeregten) Atomkern, den wir als harmonischen Oszillator beschreiben wollen. Darunter verstehen wir, dass die Bewegungen in x-, y- und z-Richtung harmonisch sind und entkoppeln. Es genügt daher, die Bewegung in x-Richtung zu untersuchen die Behandlung der Bewegung in y- und z-Richtung geht dann genau so.

Die Kreisfrequenz der Oszillation in x-Richtung sei ω. Dimensionslose Grössen:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\xi\,, \quad p = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} = \frac{\hbar}{i}\frac{d\xi}{dx}\frac{d}{d\xi} = -i\alpha\frac{d}{d\xi}$$

wo $\alpha = \sqrt{m\omega\hbar}$.

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\,, \quad a^* = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)$$

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

Damit finden wir:

$$x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\,\alpha}(a+a^*), \quad p = -i\frac{\alpha}{\sqrt{2}}(a-a^*). \qquad (31)$$

Translationen im Impulsraum:

Der Operator V_π sei durch

$$(V_\pi \hat{\psi})(p) = \hat{\psi}(p-p_0)$$

definiert. Da

$$\hat{\psi}(p-p_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}}\, e^{-\frac{ip\cdot x}{\hbar}}\,\psi(x)\,dx,$$

folgt

$$V_\pi = e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}} \stackrel{(31)}{=} e^{\frac{i\pi}{\sqrt{2}}(a+a^*)}, \qquad (32)$$

wo $\quad \pi = \frac{p_0}{\alpha} = \frac{p_0}{\sqrt{m\omega\hbar}}$ (dimensionslose Impuls-variable)

Haben benützt, dass $x = i\hbar\frac{d}{dp} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\,\alpha}(a+a^*)$.

Die zweite Gl. haben wir in den Übungen bewiesen.

Bei einem Stoss werde auf den Oszillator der (dimensionlose) Impuls π übertragen. Im Mössbauer Effekt geschieht dies dadurch, dass der angeregte Kern ein γ-Quant emittiert, dessen Impuls in

x- Richtung gerade $p_x^\gamma = -p_0 = -\alpha\pi$ ist.

Der Zustand des Kerns vor dem Stoss sei z. B. durch u_n beschrieben. Dann ist er, auf grund der Impulserhaltung, nach dem Stoss durch $V_\pi u_n$ beschrieben.

Die Wahrscheinlichkeit, $w_{nn'}$, dafür, dass der Kern nach dem Stoss sich bei einer <u>Energiemessung</u> im Zustand $u_{n'}$ befindet ist quantenmechanisch durch

$$w_{nn'} = \left| \langle u_{n'}, V_\pi u_n \rangle \right|^2 \qquad (33)$$

gegeben. Hier stossen wir auf ein <u>allgemeines Prinzip</u>: Sei A eine observable Grösse. Quantenmechanisch wird A durch einen selbstadjungierten Operator auf dem Hilbertraum $\mathcal{H}$ des Systems beschrieben. Ein Operator A ist <u>selbstadjungiert</u>, falls $D(A) = D(A^*)$ ($D(A)$: Definitionsbereich von

A), und $A = A^*$ ist. Ein selbstadjungierter Operator kann immer diagonalisiert werden. Falls das Spektrum von A diskret ist, so kann A durch

$$A = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n P_n \qquad (34)$$

dargestellt werden, wo α_n die Eigenwerte von A sind, und P_n der orthogonale Projektor auf den Eigenraum von A zum Eigenwert α_n ist. (Sei $\{u_n^j\}_{j=1}^{k(n)}$ eine (z.B. orthonormale) Basis von Eigenvektoren von A zum Eigenwert α_n. Dann ist P_n der orthogonale Projektor auf den durch die Vektoren $u_n^1, \dots, u_n^{k(n)}$ aufgespannten Unterraum von $\mathcal{H}$. Man nennt α_n nicht entartet, falls $k(n) = 1$ ist.) Nehmen wir nun an, das System befinde sich in einem "Zustande" $\psi \in \mathcal{H}$ zum Zeitpunkt, wo wir die Observable A

messen. Wir möchten die Wahrscheinlichkeit, $w_n^{A,\psi}$, dafür angeben, dass wir bei Messung von A den Wert α_n finden. Genau wie für Orts- und Impulsmessungen diskutiert, gilt nun das

<u>Prinzip:</u>

$$w_n^{A,\psi} = \langle \psi, P_n \psi \rangle . \qquad (35)$$

Falls der Eigenwert α_n nicht entartet ist ($k(n)=1$), so folgt aus (35), dass

$$w_n^{A,\psi} = |\langle \psi, u_n \rangle|^2 , \qquad (36)$$

wo u_n der zum Eigenwert α_n von A gehörige Eigenvektor ist. (Denn $P_n \psi = \langle u_n, \psi \rangle u_n$!)

Als Spezialfall von (36) finden wir wieder (33).

Nun kehren wir zum Mössbauer Effekt zurück. Wir fragen: Was ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich bei Emission eines γ-Quants mit Impuls $-p_0$

die <u>Oszillationsenergie</u> des Kerns nicht ändert?

Nach (36), (33) ist diese Wahrscheinlichkeit

$$w_n \equiv w_{nn} = |\langle u_n, V_\pi u_n \rangle|^2, \qquad (37)$$

falls der Kern vor der Emission des γ- Quants im Zustand u_n war. Nun haben wir, dass

$$V_\pi = e^{i\frac{\pi}{\sqrt{2}}(a+a^*)}, \qquad [a, a^*] = 1.$$

Es seien A und B Operatoren, $K := [A,B]$, mit $[A,K] = [B,K] = 0$. Dann gilt

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-K/2} \qquad (38)$$

(Beweis: Übungen!) Wegen (38) gilt also

$$V_\pi = e^{i\frac{\pi}{\sqrt{2}}a^*} \cdot e^{i\frac{\pi}{\sqrt{2}}a} e^{-\frac{\pi^2}{4}} \qquad (39)$$

Nun gilt $a u_0 = 0$, also $e^{i\frac{\pi}{\sqrt{2}}a} u_0 = u_0$, und $\left(e^{i\frac{\pi}{\sqrt{2}}a^*}\right)^* = e^{-\frac{i\pi}{\sqrt{2}}a}$. Damit finden wir

$$w_0 = |\langle u_0, V_\pi u_0 \rangle|^2 = e^{-\pi^2/2}. \qquad (40)$$

Die Wahrscheinlichkeit für elastische (resp. rückstossfreie) Streuung von Teilchen (γ-Quanten, Neutronen, etc.) an einem harmonischen Oszillator (Kristall) bei Temperatur $T = 0$ ist proportional zu w_0 (Debye-Waller Faktor).

Mit etwas mehr Aufwand kann man den Debye-Waller Faktor für elastische Streuung, resp. rückstossfreie Emission eines γ-Quants, auch für einen Kristall der Temperatur T berechnen und findet (nach F. Bloch):

$$w(T) \underset{\uparrow}{=} \exp\left(-\frac{\pi^2}{2} \operatorname{Coth} \frac{\hbar\omega}{2 k_B T}\right) \qquad (41)$$

(Baltensperger)

Daraus ersehen wir, dass die Wahrscheinlichkeit für eine rückstossfreie Mössbauer Emission eines γ-Quants mit zunehmender Temperatur T abnimmt!

Wir wollen (41) an dieser Stelle nicht herleiten.