7 Der harmonische Oszillator

Hamilton-Operator (1D harmonischer Oszillator):

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

Stationäre Schrödinger-Gleichung (Eigenwert-Problem):

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Algebraische Lösung:

Bestimmung des Spektrums allein mithilfe der fundamentalen Kommutatorrelation $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$

Definition (Leiteroperatoren):

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right) \\ \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right) \end{aligned}}$$

"Absteigeoperator"

"Aufsteigeoperator"

Bemerkung:

$\hat{a} \neq \hat{a}^\dagger$ nicht hermitesch

Kommutator:

$$[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2\hbar}\left[\sqrt{m\omega}\,\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\,,\ \sqrt{m\omega}\,\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right]$$

$$= \frac{1}{2\hbar}\left(-i\,[\hat{x},\hat{p}] + i\,[\hat{p},\hat{x}]\right)$$

$$= 1$$

Also

$$\boxed{[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = 1} \qquad \text{und} \qquad [\hat{a},\hat{a}] = [\hat{a}^\dagger,\hat{a}^\dagger] = 0$$

Umkehrung:

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)\\ \hat{p} &= -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\,(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)\end{aligned}}$$

Hamilton-Operator:

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

$$= \frac{\hbar\omega}{4}\left[-(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)^2 + (\hat{a}+\hat{a}^\dagger)^2\right]$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4}\left(-\cancel{\hat{a}^2} - \cancel{\hat{a}^{\dagger 2}} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \cancel{\hat{a}^2} + \cancel{\hat{a}^{\dagger 2}} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right)$$

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

$$= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \underbrace{\tfrac{1}{2}\hat{a}\hat{a}^\dagger - \tfrac{1}{2}\hat{a}^\dagger\hat{a}}_{=\frac{1}{2}[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2}}\right)$$

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

Also:

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

Besetzungszahloperator:

$$\hat{n} := \hat{a}^\dagger\hat{a}$$

Eigenschaften:

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

(2) Erwartungswerte nicht-negativ:

$$\langle\hat{n}\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{n}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi\rangle = \|a|\psi\rangle\|^2 \geq 0$$

(3) Eigenwerte nicht-negativ:

$$\underset{\uparrow\,\text{Eigenzustand}}{\hat{n}|n\rangle} = \underset{\uparrow\,\text{Eigenwert}}{n}|n\rangle \quad\Rightarrow\quad n = \langle n|\hat{n}|n\rangle \geq 0$$

(4) Spektrum: $n \in \mathbb{N}_0 = \{0,1,2,3,\dots\}$

Beweis von (4):

$$\hat{n}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \hat{a}^\dagger(\underbrace{[\hat{a},\hat{a}^\dagger]}_{=1} + \underbrace{\hat{a}^\dagger\hat{a}}_{=\hat{n}})|n\rangle = (n+1)(\hat{a}^\dagger|n\rangle)$$

$$\hat{n}(\hat{a}|n\rangle) = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}|n\rangle = (\hat{a}\hat{a}^\dagger - \underbrace{[\hat{a},\hat{a}^\dagger]}_{=1})\hat{a}|n\rangle = \hat{a}(\underbrace{\hat{a}^\dagger\hat{a}}_{=\hat{n}}-1)|n\rangle = (n-1)(\hat{a}|n\rangle)$$

$\Rightarrow$ $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ Eigenzustand von $\hat{n}$ mit Eigenwert $n+1$
$\hat{a}|n\rangle$ Eigenzustand von $\hat{n}$ mit Eigenwert $n-1$

$\Rightarrow$ $\hat{a}^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle$ "Aufsteigeoperator"
$\hat{a}|n\rangle \propto |n-1\rangle$ "Absteigeoperator"

Normierung:

$$\| a^\dagger|n\rangle \|^2 = \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}+1|n\rangle = n+1$$

$$\| a|n\rangle \|^2 = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n$$

Also:

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \\ a|n\rangle &= \sqrt{n}\,|n-1\rangle \end{aligned}}$$

$\Rightarrow$ Spektrum ist <u>äquidistant</u> mit Abstand 1.

Grundzustand:

$$\hat{n}\,|n_{min}\rangle = n_{min}\,|n_{min}\rangle \qquad \text{mit} \quad n \geq n_{min} \geq 0$$

$$\Rightarrow \quad \hat{a}\,|n_{min}\rangle \overset{!}{=} 0 \qquad (|n_{min}-1\rangle \text{ ist der Nullvektor})$$

$$\Rightarrow \quad \hat{n}\,|n_{min}\rangle = \hat{a}^{+}\hat{a}\,|n_{min}\rangle = 0$$

$$\Rightarrow \quad n_{min} = 0$$

Fazit:

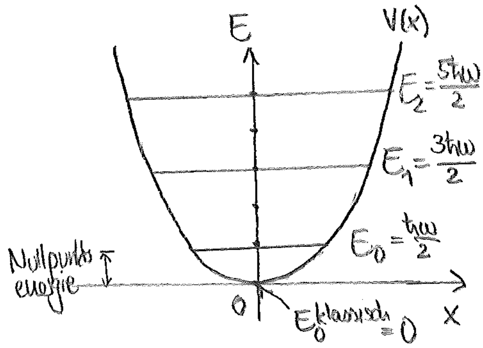
$\boxed{\text{Die Eigenwerte von } \hat{n} = \hat{a}^{+}\hat{a} \text{ mit } [\hat{a},\hat{a}^{+}] = 1 \text{ sind die nicht-negativen ganzen Zahlen } n \in \mathbb{N}_0 = \{0,1,2,\ldots\}.}$

Die Eigenzustände sind $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,(\hat{a}^{+})^{n}\,\underbrace{|0\rangle}_{\text{Grundzustand}}$ mit $\hat{a}\,|0\rangle = 0$.

w.z.z.w.

Spektrum des harmonischen Oszillators:

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right) \qquad \text{mit } n \in \mathbb{N}_0}$$



Grundzustandsenergie:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} > E_0^{klassisch} = \min_x V(x) = 0 \qquad \text{"Nullpunktsenergie"}$$

Eigenzustände in der Ortsraumdarstellung

Ortsraumdarstellung:

$$\psi_n(x) = \langle x | n \rangle$$

Abkürzung (Oszillatorlänge):

$$\alpha := \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad \Rightarrow \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}}{\alpha} + \frac{i\alpha\hat{p}}{\hbar}\right)$$

$$\hat{a}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}}{\alpha} - \frac{i\alpha\hat{p}}{\hbar}\right)$$

Grundzustand $|0\rangle$:

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad 0 = \langle x|\hat{a}|0\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle x| \frac{\hat{x}}{\alpha} + \frac{i\alpha\hat{p}}{\hbar} |0\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\underset{\substack{\uparrow \\ \text{Ortsoperator}}}{\frac{x}{\alpha}} + \frac{i\alpha}{\hbar} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Impulsoperator}}}{(-i\hbar\partial_x)} \right) \underbrace{\langle x|0\rangle}_{=\psi_0(x)}$$

in Ortsraumdarstellung

$$\Rightarrow \quad \left(\alpha^2 \partial_x + x\right)\psi_0(x) = 0$$

$$\Rightarrow \quad \psi_0(x) \propto e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}$$

Normierte Grundzustandswellenfunktion:

$$\boxed{\psi_0(x) = \frac{1}{(\pi\alpha^2)^{1/4}}\, e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}}$$

Angeregte Zustände $(n>0)$:

$$\psi_n(x) = \langle x | n \rangle$$

$$= \langle x | \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^{+})^n | 0 \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{(\sqrt{2})^n} \left(\frac{x}{\alpha} - \alpha \partial_x \right)^n \langle x | 0 \rangle$$

$$= \frac{1}{(\pi \alpha^2)^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{n! \, 2^n}} \left(\frac{x}{\alpha} - \alpha \partial_x \right)^n e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}$$

$$= \frac{1}{(\pi \alpha^2)^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{n! \, 2^n}} e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}} H_n\left(\frac{x}{\alpha}\right)$$

Hermite-Polynome:

$$H_n(y) = e^{\frac{y^2}{2}} (y - \partial_y)^n e^{-\frac{y^2}{2}}$$

mit

$H_0(y) = 1$ gerade

$H_1(y) = 2y$ ungerade

$H_2(y) = 4y^2 - 2$ gerade

$\vdots$

Skizze: