6. Harmonischer Oszillator

1-dim. harm. Oszillator (HO) mit Hamilton Op.

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{Q}^2$$

HO hat viele Anwendungen in Physik

z.B. Photonen des elmagn. Feldes
Phononen im Festkörper
Molekülschwingungen

klassisch: lineares Kraftgesetz $F = -\frac{dV}{dx} = -\underbrace{m\omega^2}_{k} x$

Von 1-dim. Problemen und bisherigen QM Betrachtungen

→ Diskretes Energiespektrum

Hier: Algebraische Lösung der Schrödingergl.

Natürliche Variablen

$$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x \quad \longrightarrow \quad \hat{\tilde{Q}} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, \hat{Q}$$

$$\hat{\tilde{P}} = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}\hat{P}$$

$$\Rightarrow [\hat{\tilde{P}}, \hat{\tilde{Q}}] = \frac{1}{\hbar}[\hat{P}, \hat{Q}] = -i$$

Definiere Operator $\boxed{\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\tilde{Q}} + i\hat{\tilde{P}}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y + \frac{\partial}{\partial y}\right)}$

$$\Rightarrow \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\tilde{Q}} - i\hat{\tilde{P}})$$

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

Es gilt: $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$ oder $\hat{a}\hat{a}^+ = \hat{a}^+\hat{a} + 1$

und $\hat{\tilde{Q}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^+)$ und $\hat{\tilde{P}} = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^+)$

Untersuche Eigenwertgleichung:

$$\hat{a}^+\hat{a}\,|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \qquad (\rightarrow \hat{H}|\lambda\rangle = \hbar\omega(\lambda+\tfrac{1}{2})|\lambda\rangle)$$

$\Rightarrow$ 1. $\lambda = \langle\lambda|\hat{a}^+\hat{a}|\lambda\rangle = \|\hat{a}|\lambda\rangle\|^2 \geq 0$

2. Ist λ Eigenwert $\Rightarrow \lambda+1$ ist auch EW

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

$\Rightarrow \hat{a}^+|\lambda\rangle$ ist Eigenzustand mit EW $\lambda+1$

und $\hat{a}^+|\lambda\rangle \neq 0$

da $\|\hat{a}^+|\lambda\rangle\|^2 = \langle\lambda|\hat{a}\hat{a}^+|\lambda\rangle$
$= \langle\lambda|\hat{a}^+\hat{a}+1|\lambda\rangle = \lambda+1 \geq 1$

3. Analog kann man für $\lambda > 0$ zeigen, dass

$$\hat{a}^+\hat{a}\,(\hat{a}|\lambda\rangle) = (\lambda-1)\,\hat{a}|\lambda\rangle$$

und $\hat{a}|\lambda\rangle \neq 0$

4. Start bei Zustand mit Eigenwert $\lambda > 0$

$\Rightarrow$ Anwendung von $\hat{a}|\lambda\rangle$ generiert absteigende Folge von Eigenwerten $\lambda-1, \lambda-2, \ldots$ solange Eigenwerte positiv bleiben (siehe 1.)

$\Rightarrow$ Es muss ein n geben, so dass $\hat{a}|\lambda-n\rangle = 0$

$\Rightarrow 0 = \hat{a}^+\hat{a}\,|\lambda-n\rangle = (\lambda-n)\,|\lambda-n\rangle$

$\Rightarrow \lambda - n = 0 \quad \Rightarrow \lambda = n \quad$ mit $n = 1, 2, 3, \ldots$

$\Rightarrow \lambda = 0, 1, 2, 3, \ldots \quad \lambda \in \mathbb{N}_0$

Sukzessive Anwendung von $\hat{a}^+$ erzeugt Leiter von Eigenzuständen

$$\begin{tikzcd}
0 & {|0\rangle} \arrow[l, bend left, "\hat{a}"] \arrow[r, bend left, "\hat{a}^+"] & {|1\rangle} \arrow[l, bend left, "\hat{a}"] & \cdots & {|n-1\rangle} \arrow[r, bend left, "\hat{a}^+"] & {|n\rangle} \arrow[l, bend left, "\hat{a}"] \arrow[r, bend left, "\hat{a}^+"] & {|n+1\rangle} \arrow[l, bend left, "\hat{a}"]
\end{tikzcd}$$

$\hat{a}^+, \hat{a}$ heißen Auf- und Absteigeoperatoren

5. Konstruktion der normierten Eigenzustände $|n\rangle$

$|0\rangle$, Grundzustand mit $\lambda = 0$

$|1\rangle = \hat{a}^+|0\rangle$, $\langle 1|1\rangle = \langle 0|\hat{a}\hat{a}^+|0\rangle$

normiert ✓

$= \langle 0|\hat{a}^+\hat{a} + 1|0\rangle = 1$

$|2\rangle = c_2\, \hat{a}^+|1\rangle$, $\langle 2|2\rangle = c_2^2\, \langle 1|\hat{a}\hat{a}^+|1\rangle$

$= c_2^2\, \langle 1|\hat{a}^+\hat{a} + 1|1\rangle$

$= \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^+|1\rangle$ $\qquad = c_2^2 \cdot 2$

$\vdots$

Allgemein: $\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^+|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n|0\rangle}$

$\Rightarrow$ Eigenwerte des 1d HO: $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$

äquidistantes Spektrum

Absteigeoperator: $\boxed{\hat{a}|n\rangle} = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}\hat{a}^+|n-1\rangle$

$= \frac{1}{\sqrt{n}}\left(\hat{a}^+\hat{a} + 1\right)|n-1\rangle$

$= \frac{1}{\sqrt{n}}\left(n-1+1\right)|n-1\rangle$

$= \boxed{\sqrt{n}\,|n-1\rangle}$

und Aufsteigeoperator $\hat{a}^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$

→ Leiteroperatoren

Eigenfkten in Ortsraumdarstellung

$$\varphi_n(y) = \langle y|n\rangle$$

Orthonormalsystem $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

Betrachte $\hat{a}|0\rangle = 0$ in Ortsraumdarstellung

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(y + \frac{\partial}{\partial y}\right)\varphi_0(y) = 0$$

$$\Rightarrow \varphi_0(y) = \pi^{-1/4}\, e^{-y^2/2}$$

↑ Normierung $(\varphi_0, \varphi_0) = 1$

$$\Rightarrow \varphi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{+})^n \varphi_0(y) \qquad \text{mit } \hat{a}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y - \frac{\partial}{\partial y}\right)$$

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

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

mit Hermite Polynomen $H_n(y)$

$$H_n(y) = e^{y^2/2}\left(y - \frac{\partial}{\partial y}\right)^n e^{-y^2/2}$$

und Hermite Polynome erfüllen Rekursionsrelation

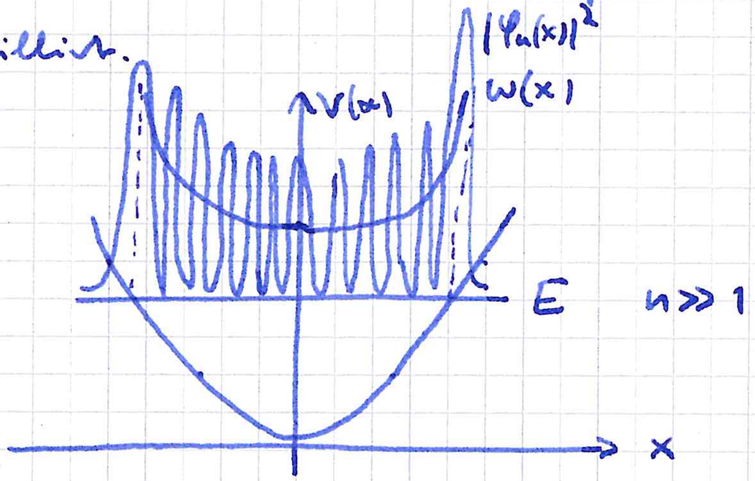
$$H_{n+1}(y) = 2y\, H_n(y) - 2n\, H_{n-1}(y)$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeit

kl. Aufenthaltswsdichte $w(x) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{x_0^2 - x^2}}$

mit $x_0^2 = \frac{2E}{m\omega^2}$ kl. Wendepkt., $w(x)$ ist maximal bei kl. Wendepkt.

Für große E, d.h. große n findet man, daß QM Wsdichte um kl. Aufenthaltswsdichte oszilliert.



Unschärfen

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\hat{a} + \hat{a}^+) \qquad \hat{P} = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\,\frac{1}{i}\,(\hat{a} - \hat{a}^+)$$

$$\Rightarrow \langle x \rangle_n = \langle n | \hat{Q} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\, \langle n | \overbrace{\hat{a}}^{\sim |n-1\rangle} + \overbrace{\hat{a}^+}^{\sim |n+1\rangle} | n \rangle = 0$$

Erwartungswert des Orts im n-ten Zustand

da Wsdichte symmetrisch um $x=0$

$$\langle x^2 \rangle = \langle n | \hat{Q}^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | \hat{a}^2 + \hat{a}^{+2} + \underbrace{\hat{a}\hat{a}^+}_{=\hat{a}^+\hat{a}+1} + \hat{a}^+\hat{a} | n \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n | 2\hat{a}^+\hat{a} + 1 | n \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1)$$

$$\Rightarrow \Delta x_n = \sqrt{\langle x^2\rangle_n - \langle x\rangle_n^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\sqrt{n+\frac{1}{2}}$$

Genauso

$$\langle p\rangle_n = 0$$

$$\langle p^2\rangle_n = \langle n|\hat{p}^2|n\rangle = -\frac{m\omega\hbar}{2}\langle n|\hat{a}^2+\hat{a}^{+2}-\hat{a}\hat{a}^{+}-\hat{a}^{+}\hat{a}|n\rangle$$

$$= \frac{m\omega\hbar}{2}\langle n|2\hat{a}^{+}\hat{a}+1|n\rangle = \frac{m\omega\hbar}{2}(2n+1)$$

$$\Rightarrow \Delta p_n = \sqrt{m\omega\hbar}\,\sqrt{n+\frac{1}{2}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta x_n \cdot \Delta p_n = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)}$$

Grundzustand $n=0$ hat minimale Unschärfen an Grenze der Heisenbergschen Unschärferel.
(Gaußfkt)
→ Nullpunktsbewegung vgl. zu klassischem Grundzustand $x=0,\ p=0$

E_0 und Δx_0 sind vernachlässigbar klein für klassische/makroskopische Systeme, aber wichtig für mikroskopische/QM Systeme!

Oszillierendes Wellenpaket

Betrachte Überlagerung von Eigenzuständen
→ Wellenpaket / Schwingung eines Teilchens in HO

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\underbrace{\langle n|\psi(t)\rangle}_{c_n(t)}$$

Aus Schrödingergl. für $|\psi(t)\rangle$ folgt

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_n(t) = \langle n|\hat{H}|\psi(t)\rangle = E_n\langle n|\psi(t)\rangle = E_n c_n(t)$$

$$\Rightarrow c_n(t) = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} c_n(0)$$

$$\Rightarrow |\varphi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0)\, e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} |n\rangle$$

$$\Rightarrow |\varphi(t+T)\rangle = -|\varphi(t)\rangle$$

mit kl. Schwingungsperiode $T = \frac{2\pi}{\omega}$

$$\Rightarrow |\langle y|\varphi(t+T)\rangle|^2 = |\langle y|\varphi(t)\rangle|^2$$

Wsdichte ist periodisch in Zeit

Betrachte Erwartungswert des Ortes

$$\langle x\rangle(t) = \langle\varphi(t)|\hat{Q}|\varphi(t)\rangle \qquad \hat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^+)$$

$$= \sum_{n,m=0}^{\infty} c_n^*(0)\, c_m(0) \langle n|\hat{Q}|m\rangle\, e^{-i(m-n)\omega t}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n}\, \Big(c_{n-1}^*(0)\, c_n(0)\, e^{-i\omega t} + c_n^*(0)\, c_{n-1}(0)\, e^{i\omega t} \Big)$$

$$= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\, \mathrm{Re}\Big(\sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n}\, c_{n-1}^*(0)\, c_n(0)\, e^{-i\omega t} \Big)$$

Kann man schreiben als $= x_0 \cos(\omega t - \text{const.})$

→ harmonische Schwingung wie in kl. Mechanik

3d Harmonischer Oszillator

allg. $V(\vec{r}) = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^{3} \omega_i^2 r_i^2$

3d sphärischer HO $V(\vec{r}) = \frac{m}{2} \omega^2 \vec{r}^{\,2}$

$\rightarrow$ $\hat{H}$ ist additiv in den 3 Koordinaten $\rightarrow$ Wellenfkt. faktorisiert

$$\Rightarrow \quad \psi_{n_1,n_2,n_3}(\vec{r}) = \varphi_{n_1}(x)\, \varphi_{n_2}(y)\, \varphi_{n_3}(z)$$

1d HO Eigenfkt.

$$E = \hbar\omega \Big(\underbrace{n_1 + n_2 + n_3}_{n = 0,1,2,3,\dots} + \frac{3}{2} \Big)$$

Entartung $= 1, 3, 6, 10, \dots$

$$\downarrow$$

$(n_1, n_2, n_3) = (2,0,0),\ (0,2,0),\ (0,0,2)$
$(1,1,0),\ (1,0,1),\ (0,1,1)$

n-ter Zustand ist $\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$-fach entartet.