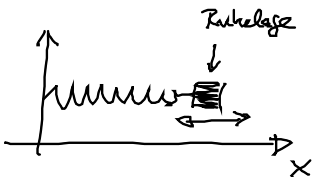


IV. Der harmonische Oszillator

→ erstes Anwendungsbeispiel des abstrakten Hilbertraum-Formalismus

Betrachten hier Oszillatoren in einer Dimension

Klassisch:  Teilchen mit Masse m und Impuls $p = mv$ unter Einfluss einer nichttreibenden Kraft

$$F(x) = -kx$$

$$\text{Potential } V = \int_0^x dx' F(x') = \frac{k}{2} x^2$$

$$\text{Hamiltonfunktion: } H(p, x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2} x^2$$

(konservatives System $H = T + V$, Energieerhaltung)

$$\text{Bwgl.: } m\ddot{x} = F(x) = -kx$$

$$x(t) = C_0 \sin(\omega_0 t), \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

harmonische Schwingung Schwingungsfrequenz

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 = E \quad (\text{klassische Hamiltonfunktion})$$

Beachte: E kann in Abhängigkeit von p und x jeden beliebigen Wert annehmen
(\Leftrightarrow) Energie kontinuierlich

Quantenmechanische Behandlung

$$\begin{aligned} p &\rightarrow \hat{p} \\ x &\rightarrow \hat{x} \end{aligned} \quad \text{„Quantisierung“}$$

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = -i\hbar \delta_{ij}$$

$$\text{Hamilton-Operator } \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \hat{x}^2$$

Anwendungen: Phononen (Vibrationsleistungen)
 Photonen (Lichtquanten)
 Plasmonen (kollektive elektronische
 Schwingungen)
 ...

Aufgabe hier: • Bestimmung des Spektrums von \hat{H}
 d.h. Energieeigenwerte und Eigenzustände
 (Formale Lösung der zeitunabhängigen
 Schrödingergleichung)
 • Ortsdarstellung der Eigenfunktion

Formale Lösung durch Leiteroperatoren:

Dopplereffekt (gelappt): $\hat{b} = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}} \hat{p}$ (weil $\hat{x}^\dagger = \hat{x}$)
 $\hat{b}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}} \hat{p}$ ($\hat{p}^\dagger = \hat{p}$)
 (Observable)

$\Rightarrow \hat{b}$ ist nicht hermitisch !!

es gilt: $\hat{b} + \hat{b}^\dagger = 2 \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} \hat{x} \Rightarrow \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (\hat{b} + \hat{b}^\dagger)$

$\hat{b} - \hat{b}^\dagger = 2 \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}} \hat{p} \Rightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{m\omega_0}{2}} (\hat{b} - \hat{b}^\dagger)$

Produkt: $\hat{b}\hat{b}^\dagger = \frac{m\omega_0}{2\hbar} \hat{x}^2 - \frac{i}{2\hbar} \hat{x}\hat{p} + \frac{i}{2\hbar} \hat{p}\hat{x} + \frac{1}{2\hbar m\omega_0} \hat{p}^2$
 $= \frac{m\omega_0}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2\hbar m\omega_0} \hat{p}^2 + \frac{i}{2\hbar} (\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p})$
 $= \frac{1}{\hbar\omega_0} \left(\frac{m}{2} \omega_0^2 \hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} \hbar \right)$

$$\Rightarrow \hat{b} \hat{b}^\dagger = \frac{1}{\hbar \omega_0} \left[\hat{H} + \frac{1}{2} \hat{U} \right]$$

analog findet man $\hat{b}^\dagger \hat{b} = \frac{1}{\hbar \omega_0} \left[\hat{H} - \frac{1}{2} \hat{U} \right] \neq \hat{b} \hat{b}^\dagger$

$$[\hat{S}, \hat{S}^\dagger] = \mathbb{1}, \quad [\hat{b}^\dagger, \hat{b}] = -\mathbb{1}$$

ausßerdem: $\hat{b} \hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger \hat{b} = \frac{2}{\hbar \omega_0} \hat{H}$

$$\hat{H} = \frac{\hbar \omega_0}{2} (\hat{b} \hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger \hat{b}) = \frac{\hbar \omega_0}{2} [\hat{S}^\dagger \hat{b} + \hat{b}^\dagger \hat{S}]$$

$$\boxed{\hat{H} = \hbar \omega_0 \left(\hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{1}{2} \hat{U} \right)}$$

definiere: $\hat{N} := \hat{b}^\dagger \hat{b}$, hermitesche, denn

$$\begin{aligned} \hat{N}^\dagger &= (\hat{b}^\dagger \hat{b})^\dagger \\ &= \hat{b}^\dagger \hat{b}^\dagger{}^\dagger = \hat{b}^\dagger \hat{b} = \hat{N} \end{aligned}$$

Beschäftigungszahloperator

(physikalische Bedeutung: \hat{N} misst die Zahl der Quantenteilchen mit bestimmtem Schwingungszustand)

$$\hat{H} = \hbar \omega_0 \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \hat{U} \right)$$

folgt daraus $[\hat{H}, \hat{N}] = 0 \Rightarrow \hat{H}$ und \hat{N} haben einen gemeinsamen Satz von Eigenzuständen!

also: sei $|n\rangle$ ein solcher Eigenzustand

$$\hat{U} = \sum_n |n\rangle \langle n| \quad (\text{VON})$$

$$\langle n | n' \rangle = \delta_{nn'}$$

Wir gehen von nicht-entarteten, diskreten Eigenwerten aus

$$\begin{aligned} \hat{H} |n\rangle &= \hbar \omega_0 \left[\hat{N} + \frac{1}{2} \hat{U} \right] |n\rangle = \hbar \omega_0 \underbrace{\hat{N} |n\rangle}_{= n |n\rangle} + \frac{\hbar \omega_0}{2} \underbrace{\hat{U} |n\rangle}_{= |n\rangle} \\ &= \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \end{aligned}$$

$$= \epsilon_n |n\rangle, \text{ also } \epsilon_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Eigenwert des harmonischen Oszillators

$$\begin{aligned} \text{es gilt: } [\hat{S}, \hat{N}] &= \hat{S}\hat{N} - \hat{N}\hat{S} = \hat{S}(\hat{S}^\dagger\hat{S} - \hat{S}\hat{S}^\dagger) \quad ([\hat{S}, \hat{S}^\dagger] = \mathbb{1}) \\ &= (\hat{S}^\dagger\hat{S} + \mathbb{1})\hat{S} - \hat{S}^\dagger\hat{S}\hat{S} = \hat{S} \end{aligned}$$

$$\text{analog } [\hat{S}^\dagger, \hat{N}] = -\hat{S}^\dagger$$

$$\begin{aligned} \text{und allgemeiner gilt: } [\hat{S}^q, \hat{N}] &= q \hat{S}^{q-1} \\ [\hat{S}^{\dagger q}, \hat{N}] &= -q (\hat{S}^\dagger)^{q-1} \quad (q \in \mathbb{N}) \end{aligned}$$

Das Eigenwertproblem von \hat{H} und \hat{N} :

$$\text{zu lösen } \hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

Behauptung: Die Ketts $\hat{S}|n\rangle$ und $\hat{S}^\dagger|n\rangle$ sind ebenfalls Eigenzustände von \hat{H} und \hat{N} , wenn $|n\rangle$ einer ist!!

$$\begin{aligned} \text{Beweis: } \hat{N}(\hat{S}|n\rangle) &= \hat{N}\hat{S}|n\rangle = (\hat{S}\hat{N} - \hat{S})|n\rangle \\ &= \hat{S}\hat{N}|n\rangle - \hat{S}|n\rangle \\ &= \hat{S}n|n\rangle - \hat{S}|n\rangle \\ &= (n-1)\hat{S}|n\rangle \end{aligned}$$

also $\hat{S}|n\rangle$ ein Eigenzustand von \hat{N} und zwar mit Eigenwert $(n-1)$

$$\hat{S}|n\rangle = \alpha |n-1\rangle \quad \alpha \text{ ist zu bestimmen}$$

$$\langle n-1 | n-1 \rangle = 1 = \frac{1}{\alpha^2} \langle \hat{S}n | \hat{S}n \rangle = \frac{1}{\alpha^2} \langle n | \underbrace{\hat{S}^\dagger \hat{S}}_{=\hat{N}} | n \rangle = \frac{n}{\alpha^2}$$

$$\Rightarrow \alpha = \sqrt{n}, \quad \hat{S}|n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$\text{analoges } \epsilon_{n-1} = \hbar\omega_0 \left(n-1 + \frac{1}{2}\right) = \epsilon_n - \hbar\omega_0$$

Interpretation/Beobachtung:

Anwendung von \hat{S} auf $|n\rangle$ erzeugt einen neuen Eigenzustand $|n-1\rangle$ mit Eigenwert $E_{n-1} = E_n - \hbar\omega_0$

man sieht: Energiespektrum ist quantisiert, denn

$$\Delta E = E_n - E_{n-1} = \hbar\omega_0 !!$$

\hat{S} verringert die Energie um $\hbar\omega_0$, also wird es Absenkeroperator genannt.

$$\hat{N} \hat{S}^+ |n\rangle = (\hat{S}^+ \hat{N} + \hat{S}^+) |n\rangle = (n+1) \hat{S}^+ |n\rangle$$

$$\hat{S}^+ |n\rangle = \beta |n+1\rangle$$

über Normierung β bestimmen

$$\langle n+1 | n+1 \rangle = 1 = \langle \hat{S}^+ n | \hat{S}^+ n \rangle = \frac{1}{\beta^2} \langle n | \underbrace{\hat{S} \hat{S}^+}_{= \hat{N} + 1} | n \rangle$$

$$\text{also } \beta = \sqrt{n+1} \quad \text{und} \quad \hat{S}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

$$E_{n+1} = E_n + \hbar\omega_0 \quad (\text{Erzeuger- oder Aufsteigeroperator})$$

Zusammenfassend:

Mit Hilfe der Operatoren \hat{S}, \hat{S}^+ kann man im Raum der Eigenzustände (d.h. dem dazugehörigen Hilbertraum) von Zustand zu Zustand klettern \rightarrow "Leiteroperatoren"

Existenz des Grundzustandes (oder gibt es eine untere Schranke?)

Erster konnte man denken:

ausgehend von einem Eigenzustand $|n\rangle$ kann man durch mehrfaches Anwenden von „Absteiger“- oder „Erreigeroperator mit beliebigen Energie erzeugen
 → geht jedoch nicht

Hintergrund: es gilt einerseits $\langle u | \hat{N} | u \rangle = \langle u | \hat{b}^\dagger \hat{b} | u \rangle$

$$\langle u | v \rangle = \langle v | u \rangle^*$$

$$= \underbrace{\langle \hat{b}^\dagger | \hat{b}^\dagger \rangle}_{\geq 0} \underbrace{\langle u | u \rangle}_{\geq 0} \geq 0$$

(Norm, Konstruktion
unseres metrischen
Hilbertraums)

andererseits:

$$\begin{aligned} \langle u | \hat{N} | u \rangle &= \\ &= \langle u | \hat{H} - \frac{\hbar \omega_0}{2} \hat{1} | u \rangle = E_n - \frac{\hbar \omega_0}{2} \end{aligned}$$

Zombinieren $0 \leq \underbrace{\langle u | \hat{N} | u \rangle}_{\text{über die Norm}} = E_n - \frac{\hbar \omega_0}{2}$

$$E_n \geq \frac{\hbar \omega_0}{2} \quad (\text{das heißt: es gibt eine untere Schranke für die Energie})$$

Da andererseits $E_n = \hbar \omega_0 (n + \frac{1}{2}) = \langle u | \hat{H} | u \rangle$

folgt die Existenz des Grundzustandes mit $n=0$

$$E_0 = \frac{\hbar \omega_0}{2} \Leftrightarrow \text{für } |n=0\rangle \text{ Eigenzustand}$$

Folgerung: aus der Existenz des Grundzustandes

es gilt: $\hat{b} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$

$$\hat{b} |1\rangle = \sqrt{1} |0\rangle = |0\rangle \leftarrow \text{Eigenket zue Grundzustand (nach Voraussetzung gilt } \langle 0 | 0 \rangle = 1, \text{ usw.)}$$

$\hat{b}^n |n\rangle = |0\rangle$ (n -maliges Anwenden von \hat{b}^n auf Eigenzustand $|n\rangle$ führt auf Grundzustand)

aber: $\hat{b}^{n+1} |n\rangle = 0$ ($\Leftrightarrow \hat{b}^n |0\rangle \stackrel{!}{=} 0$)

Konstruktion der angeregten Zustände aus $|0\rangle$

$$\hat{b}^+ |0\rangle = \sqrt{1} |1\rangle = \sqrt{1} |1\rangle$$

$$(\hat{b}^+)^2 |0\rangle = \hat{b}^+ \hat{b}^+ |0\rangle = \sqrt{1} \hat{b}^+ |1\rangle = \sqrt{1} \sqrt{2} |2\rangle = \sqrt{1} \sqrt{2} |2\rangle$$

$$(\hat{b}^+)^n |0\rangle = \sqrt{1} \sqrt{2} \dots \sqrt{n} |n\rangle = \sqrt{n!} |n\rangle$$

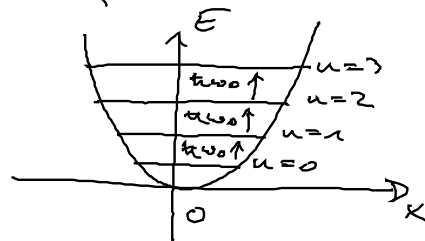
$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^+)^n |0\rangle$$

Zusammenfassung der formalen Lösung des 1d-Harmonischen Oszillators mit der Quantenmechanik (darstellungsunabhängig). [Erweiterung $u = \sum_n |n\rangle \langle n|$ von]

$$\hat{H} |n\rangle = \epsilon_n |n\rangle \quad \text{mit} \quad \hat{H} = \hbar \omega_0 \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right)$$

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle \quad \epsilon_n = \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) = \langle n | \hat{H} |n\rangle$$

\Rightarrow diskrete äquidistante Energieebenen



$$\text{Eigenzustände } |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^+)^n |0\rangle$$

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

häufig benutzte Sprechweise: Oszillator als Kettelchen-System

$$\Delta \epsilon_n = \epsilon_{n+1} - \epsilon_n = \hbar \omega_0 \quad (\text{Schwingungsquant})$$

bzw. Energie eines Quantenfeldes

$|n\rangle$: Zustand mit n Schwingungsquanten

\hat{b}^+, \hat{b} : Erzeuger bzw. Vernichter von Schwingungsquanten

$\hat{N} = \hat{b}^+ \hat{b}$: Besetzungszahloperator der Schwingungsquanten

Formale Lsg. $\hat{N} \Rightarrow$ Besetzungszahldarstellung