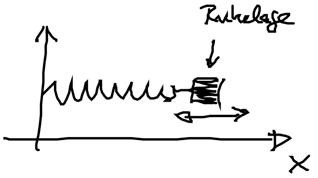
IV. Der harmonische Oszillator

→ erstes Anwendungsbeispiel des abstrakten Hilbertraum-Formalismus

Betrachten hier Oszillatoren in einer Dimension

Klassisch:



Teilchen mit Masse m und Impuls $p = m\dot{x}$ unter Einfluss einer rücktreibenden Kraft

$$F(x) = -kx$$

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

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

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

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

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

Beachte: E kann in Abhängigkeit von p und x jeden beliebigen Wert annehmen
$\Longleftrightarrow$ Energie kontinuierlich

Quantenmechanische Behandlung

$p \to \hat{p}$
$x \to \hat{x}$ „Quantisierung"

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar\, \hat{\mathbb{1}}$$

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

Anwendungen: Phononen (Vibrationsschwingungen)
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:

Definiere (geeignet):
$$\hat{b} = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}}\,\hat{p}$$
$$\hat{b}^+ = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}}\,\hat{p}$$
(weil $\hat{x}^+ = \hat{x}$, $\hat{p}^+ = \hat{p}$ Observablen)

$\Rightarrow$ $\hat{b}$ ist <u>nicht</u> hermitesch!!

es gilt:
$$\hat{b} + \hat{b}^+ = 2\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,\hat{x} \Rightarrow \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\,(\hat{b}+\hat{b}^+)$$
$$\hat{b} - \hat{b}^+ = 2\frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}}\,\hat{p} \Rightarrow \hat{p} = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{\hbar m\omega_0}{2}}\,(\hat{b}-\hat{b}^+)$$

<u>Produkt</u>:
$$\hat{b}\hat{b}^+ = \frac{m\omega_0}{2\hbar}\hat{x}^2 - \frac{i}{2\hbar}\underline{\underline{\hat{x}\hat{p}}} + \frac{i}{2\hbar}\underline{\underline{\hat{p}\hat{x}}} + \frac{1}{2\hbar m\omega_0}\hat{p}^2$$
$$= \frac{m\omega_0}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2\hbar m\omega_0}\hat{p}^2 + \frac{i}{2\hbar}\underbrace{(\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p})}_{=[\hat{p},\hat{x}] = -i\hbar\mathbb{1}}$$
$$= \frac{1}{\hbar\omega_0}\left(\frac{m}{2}\omega_0^2\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}\mathbb{1}\right)$$

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

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

$[\hat{b}, \hat{b}^+] = \mathbb{1}$, $[\hat{b}^+, \hat{b}] = -\mathbb{1}$

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

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega_0}{2}(\hat{b}\hat{b}^+ + \hat{b}^+\hat{b}) = \frac{\hbar\omega_0}{2}\left[\hat{b}^+\hat{b} + \mathbb{1} + \hat{b}^+\hat{b}\right]$$

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

definiere: $\hat{N} := \hat{b}^+\hat{b}$, hermitesch, denn

$$\hat{N}^+ = (\hat{b}^+\hat{b})^+ = \hat{b}^+\hat{b}^{++} = \hat{b}^+\hat{b} = \hat{N}$$

Besetzungszahloperator

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

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

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

$$\mathbb{1} = \sum_n |n\rangle\langle n| \quad (\text{VONS})$$

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

wir gehen von nicht-entarteten, diskreten Eigenwerten aus

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega_0\left[\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{\mathbb{1}}\right]|n\rangle = \hbar\omega_0 \underbrace{\hat{N}|n\rangle}_{=n|n\rangle} + \frac{\hbar\omega_0}{2}\underbrace{\hat{\mathbb{1}}|n\rangle}_{=|n\rangle}$$

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

$= \varepsilon_n |n\rangle$, also $\varepsilon_n = \hbar\omega_0 (n+\frac{1}{2})$

Eigenwert des harmonischen Oszillators

es gilt: $[\hat{b},\hat{N}] = \hat{b}\hat{N} - \hat{N}\hat{b} = \underbrace{\hat{b}\hat{b}^+}_{}\hat{b} - \hat{b}^+\hat{b}\hat{b} \quad ([\hat{b},\hat{b}^+] = \mathbb{1})$

$= (\hat{b}^+\hat{b} + \mathbb{1})\hat{b} - \hat{b}^+\hat{b}\hat{b} = \hat{b}$

analog $[\hat{b}^+,\hat{N}] = -\hat{b}^+$

und allgemein gilt: $[\hat{b}^q,\hat{N}] = q\,\hat{b}^q$

$[(\hat{b}^+)^q,\hat{N}] = -q(\hat{b}^+)^q \quad (q\in\mathbb{N})$

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

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

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

Beweis: $\hat{N}(\hat{b}|n\rangle) = \hat{N}\hat{b}|n\rangle = (\hat{b}\hat{N} - \hat{b})|n\rangle$

$= \hat{b}\underbrace{\hat{N}|n\rangle}_{=n|n\rangle} - \hat{b}|n\rangle$

$= (n-1)\,\hat{b}|n\rangle$

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

$\hat{b}|n\rangle = \alpha\,|n-1\rangle$ α ist zu bestimmen

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

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

außerdem $\varepsilon_{n-1} = \hbar\omega_0(n-1+\frac{1}{2}) = \varepsilon_n - \hbar\omega_0$

Interpretation/Beobachtung:

Anwendung von $\hat{b}$ auf $|n\rangle$ erzeugt einen neuen Eigenzustand $|n-1\rangle$ mit Eigenwert $\varepsilon_{n-1} = \varepsilon_n - \hbar\omega_0$

man sieht: Energiespektrum ist quantisiert, denn

$$\Delta_\varepsilon = \varepsilon_n - \varepsilon_{n-1} = \hbar\omega_0 \quad !!$$

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

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

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

über Normierung β bestimmen

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

also $\beta = \sqrt{n+1}$ und $\hat{b}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$

$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n + \hbar\omega_0$ (Erzeuger- oder Aufsteigeroperator)

Zusammenfassend:

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

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

bisher konnte man denken:
ausgehend von einem Eigenzustand $|n\rangle$ kann man durch mehrfaches Anwenden vom Absteiger- oder Vernichteroperator mit beliebigen Energien erzeugen
— geht jedoch nicht.

<u>Hintergrund</u>: es gilt einerseits $\hbar\omega_0 \langle n|\hat{N}|n\rangle = \hbar\omega_0\langle n|\hat{b}^{+}\hat{b}|n\rangle$

$$\boxed{\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*}$$

$$= \underbrace{\langle \hat{b}n|\hat{b}n\rangle}_{\geq 0} \underbrace{\hbar\omega_0}_{\geq 0} \geq 0$$

(Norm, Konstruktion unseres metrischen Hilbertraums)

andererseits:

$$\hbar\omega_0 \langle n|\hat{N}|n\rangle =$$
$$= \langle n|\hat{H} - \frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{\mathbb{1}}|n\rangle = \varepsilon_n - \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

kombiniere $0 \leq \underbrace{\langle n|\hat{N}|n\rangle}_{\text{über die Norm}} = \varepsilon_n - \frac{\hbar\omega_0}{2}$

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

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

folgt die Existenz des Grundzustandes mit $n=0$

$\varepsilon_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \Leftrightarrow$ für $|n=0\rangle$ Eigenzustand

<u>Folgerung</u>: aus der Existenz des Grundzustandes

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

$\hat{b}|1\rangle = \sqrt{1}\,|0\rangle = |0\rangle \leftarrow$ Eigenket zum Grundzustand (nach Voraussetzung gilt $\langle 0|0\rangle = 1$, UOAS)

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

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

Konstruktion der angeregten Zustände aus $|0\rangle$

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

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

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

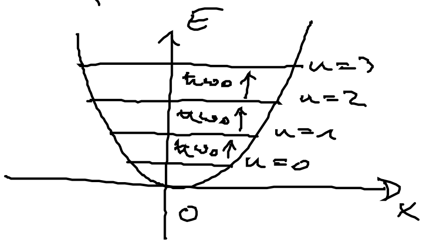
$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^+)^n |0\rangle$

Zusammenfassung der formalen Lösung des 1d-Harmonischen Oszillators in der Quantenmechanik (darstellungsunabhängig). [Forderung $\underline{1} = \sum_n |n\rangle\langle n|$ vollst.]

$\hat{H} |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle$ mit $\hat{H} = \hbar\omega_0 (\hat{N} + \frac{1}{2} \hat{\underline{1}})$

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

$\Rightarrow$ diskretes äquidistantes Energiespektrum



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

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

häufig benutzte Sprechweise: Oszillator als Vielteilchen-System

$\Delta\varepsilon_n = \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n = \hbar\omega_0$ („Schwingungsquant")
bzw. Energie einer Quasiteilchens

$|n\rangle$: Zustand mit n Schwingungsquanten

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

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

Formale Lsg. $\hat{=}$ Besetzungszahldarstellung