Harmonischer Oszillator

Klass.: $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$
(1d)

qm: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \hat{x}^2$ $\quad [\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \hat{1}$

IV.1. Formale Lösung des Eigenwertproblems von $\hat{H}$ durch Leiteroperatoren

$$\hat{b} = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\, \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m \omega_0}}\, \hat{p}$$ Absteiger / Vernichter

$$\hat{b}^+ = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\, \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m \omega_0}}\, \hat{p}$$ Aufsteiger / Erzeuger

$\hat{b}$ ist also nicht hermitesch!

Produkt:

$$\hat{b}\hat{b}^+ = \ldots = \frac{1}{\hbar\omega_0}\left(\frac{m}{2}\omega_0^2 \hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m}\right) + \frac{1}{2}\hat{1}$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega_0}\hat{H} + \frac{1}{2}\hat{1}$$

analog:

$$\hat{b}^+\hat{b} = \frac{1}{\hbar\omega_0}\hat{H} - \frac{1}{2}\hat{1}$$

Folgerung: • $[\hat{b},\hat{b}^+] = \hat{b}\hat{b}^+ - \hat{b}^+\hat{b} = \hat{1}$

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

$$\Rightarrow \hat{H} = \frac{\hbar\omega_0}{2}\Big(\underbrace{\hat{b}\hat{b}^+}_{\hat{b}^+\hat{b}+\hat{1}} + \hat{b}^+\hat{b}\Big) = \frac{\hbar\omega_0}{2}\left(\hat{b}^+\hat{b} + \hat{1} + \hat{b}^+\hat{b}\right)$$

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

definiere noch:

$\hat{N} = \hat{b}^+\hat{b}$ „Besetzungszahl-Operator"
„Teilchenzahl-Operator"

$(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$

$\hat{N}$ ist hermitisch.

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

Einsetzen: $\boxed{\hat{H} = \hbar\omega_0\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{1}\right)}$ (*)

aus (*) sieht man sofort: $[\hat{H},\hat{N}] = 0$!

da $[\hat{N},\hat{N}]=0$
und $[\hat{N},\hat{1}]=0$

$\Rightarrow$ $\hat{H}$ und $\hat{N}$ haben ein gemeinsames System aus Eigenzuständen!

also: $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ (Annahme: Eigenwerte sind nicht entartet und diskret, d.h. $\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}$)

Eigenzustand — Eigenwerte

$$\Rightarrow \hat{H}|n\rangle \overset{(*)}{=} \hbar\omega_0 \hat{N}|n\rangle + \frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{1}|n\rangle$$
$$= \hbar\omega_0 n|n\rangle + \frac{\hbar\omega_0}{2}|n\rangle$$
$$= \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right)|n\rangle$$

definiere: $\boxed{\varepsilon_n = \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right)}$ $\Rightarrow \hat{H}|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle$

Energieeigenwerte des harmon. Oszillators

<u>Zu lösen:</u> Eigenwertproblem
$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

Behauptung: Die Zustände
$$\hat{b}|n\rangle \text{ und } \hat{b}^\dagger|n\rangle$$
sind ebenfalls Eigenzustände von $\hat{N}$ (bew. !!)!

Beweis

i) Zeige das zunächst für $\hat{b}|n\rangle$!

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

NR:
$$[\hat{b},\hat{N}]=\hat{b}\underbrace{\hat{b}^+\hat{b}}_{\hat{N}}-\hat{b}^+\hat{b}\hat{b}$$
$$=(\hat{b}^+\hat{b}+1)\hat{b}-\hat{b}^+\hat{b}\hat{b}$$
$$\boxed{[\hat{b},\hat{b}^+]=1}$$
$$=\cancel{\hat{N}}\hat{b}+\hat{b}-\cancel{\hat{N}\hat{b}}$$
$$=\hat{b}$$

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

$\Rightarrow$ Beh. ! $\hat{b}|n\rangle$ ist Eigenzust. zum Eigenwert $n-1$!

schreibe: $\hat{b}|n\rangle=\alpha|n-1\rangle$ (**)

mit α Normierungsfaktor

Festlegung von α:

$$\langle n-1|n-1\rangle \overset{(**)}{=} \frac{1}{\alpha^2}\langle\hat{b}n|\hat{b}n\rangle$$
$$=\frac{1}{\alpha^2}\langle n|\underbrace{\hat{b}^+\hat{b}}_{\hat{N}}|n\rangle$$
$$=\frac{1}{\alpha^2}\,n\underbrace{\langle n|n\rangle}_{1}=\frac{n}{\alpha^2}\overset{!}{=}1$$

$\Rightarrow \alpha=\sqrt{n}$

Einsetzen in (**)

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

$$\boxed{\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle}$$

außerdem:

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

zugehörige Energie:

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

man sieht bereits hier: Das Spektrum von $\hat{H}$ ist quantisiert (diskret)
Abstand zweier benachbarter Energien ist $\hbar\omega_0$

ii) Zeige, daß auch $\hat{b}^+|n\rangle$ ein Eigenzustand von $\hat{N}$ bzw. $\hat{H}$ ist

$\hat{N}\hat{b}^+|n\rangle$

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

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

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

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

$\Rightarrow$ $\hat{b}^+|n\rangle$ ist tatsächlich Eigenzustand von $\hat{N}$ zum Eigenwert $n+1$!

$\Rightarrow$ Ansatz: $\hat{b}^+|n\rangle = \beta|n+1\rangle$

Normierung

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

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

$$= \frac{n+1}{\beta^2} \stackrel{!}{=} 1$$

$$\hat{b}\hat{b}^+ = \hat{b}^+\hat{b}+1 = \hat{N}+1$$

$$\Rightarrow \beta = \sqrt{n+1}$$

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

zugehörige Energie:

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

$\hat{b}^+$ erzeugt also einen neuen Eigenzustand zum Energieeigenwert ε_{n+1} (bzw. zum Eigenwert $n+1$ des Operators $\hat{N}$)

Zusammenfassend:
Mit Hilfe der Operatoren $\hat{b}$ und $\hat{b}^+$ kann man im Raum der Eigenzustände von Zustand zu Zustand klettern $\longrightarrow$ „Leiteroperatoren"

Existenz eines Grundzustandes

Frage: Kann man durch Anwenden des Absteigeoperators $\hat{b}$ Eigenzustände mit beliebig tiefer Energie erzeugen?

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

Antwort: Nein!

Grund:

einerseits: $\hbar\omega_0 \langle n|\hat{N}|n\rangle = \hbar\omega_0 \langle n|\hat{b}^\dagger\hat{b}|n\rangle$

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

$$\geq 0$$

(Skalarprodukt eines Zustandes mit sich selbst)

andererseits: $\hbar\omega_0 \langle n|\hat{N}|n\rangle$

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

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

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

$$\Rightarrow \hbar\omega_0 \langle n|\hat{N}|n\rangle =$$

$$= E_n \underbrace{\langle n|n\rangle}_{1} - \frac{\hbar\omega_0}{2}\langle n|n\rangle$$

$$= E_n - \frac{\hbar\omega_0}{2}$$

Kombiniere:

$$\varepsilon_n - \frac{\hbar\omega_0}{2} \geq 0 \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\varepsilon_n \geq \frac{\hbar\omega_0}{2}}$$

Es gibt also eine untere Schranke für die Energie

$\hat{=}$ Es gibt einen Grundzustand!

benutze:

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

Der Grundzustand ist definiert durch den Eigenwert $n=0$ von $\hat{N}$

bzw. dem Energieeigenwert $\varepsilon_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$ von $\hat{H}$!

Folgerungen für die Zustände

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

$$\underbrace{\hat{b}|1\rangle}_{\text{Zustand zu } n=1} = \sqrt{1}\,\underbrace{|0\rangle}_{\text{Zustand zu } n=0} = |0\rangle$$

(„1. angeregter Zustand")

$$\hat{b}^n |n\rangle = |0\rangle$$

n-maliges Anwenden des Absteiger führt wieder auf den Grundzustand!

aber:

$$\hat{b}^{n+1}|n\rangle \stackrel{!}{=} 0$$

(d.h. auch $\hat{b}|0\rangle = 0$) reflektiert die Tatsache, daß es eine untere Schranke für die Energie gibt!

Konstruktion der angeregten Zustände

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

Folgerung (s. Übung)

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

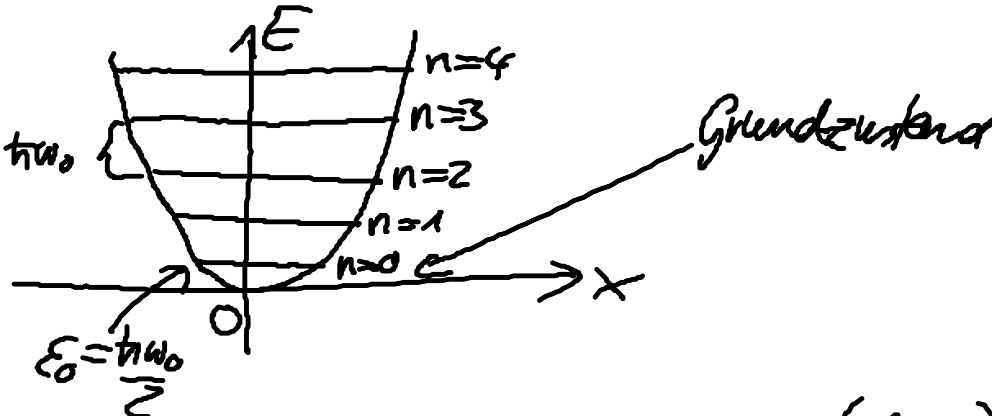
Zusammenfassung der formalen Lösung (algebraische Lösung)

$$\hat{H}|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle \quad , \quad \hat{H} = \hbar\omega_0\left(\hat{N} + \tfrac{1}{2}\mathbb{1}\right)$$

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \quad , \quad \varepsilon_n = \hbar\omega_0\left(n + \tfrac{1}{2}\right) \text{ mit } n = 0, 1, 2, \ldots$$

d.h. Das Spektrum ist diskret und äquidistant

$\longrightarrow$ da $\varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n = \hbar\omega_0$ unabhängig von n



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

mit $\langle n|n'\rangle = \delta_{n,n'}$

und $\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = 1$

Vollständigkeitsgerade

<u>häufig benutzte Sprechweise:</u>

Oszillator als Vielteilchensystem

$|n\rangle$: Zustand mit n „Schwingungsquanten"

Dabei ist ein Schwingungsquant gerade $\Delta\varepsilon_n = \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n = \hbar\omega_0$

$\hat{b}^+, \hat{b}$: Erzeuger bzw. Vernichter eines Schwingungsquants

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

$\hat{N} = \hat{b}^+\hat{b}$: Besetzungsoperator bzw. Teilchenzahloperator der Schwingungsquanten

└ Phononen (Gitterschwingungen)
Teilchen eines Strahlungsfeldes

Formale Lösung $\hat{=}$ Lösung in „Besetzungszahldarstellung"

IV.2. Ortsdarstellung

gesucht: Ortsraumwellenfunktion

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

(analog zu $\psi(\underline{r}) = \langle \underline{r}|\psi\rangle$)

betrachte die Wirkung der Leiteroperatoren im Ortsraum

$$\hat{b}\,\varphi_n(x) = \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}}\,\hat{p}\right)\varphi_n(x)$$

benutze $\hat{x} \to x$

$\hat{p} \to \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ i.d. Ortsdarstellung

$$\Rightarrow \hat{b}\,\varphi_n(x) = \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,x + \frac{\hbar}{\sqrt{2\hbar m\omega_0}}\frac{d}{dx}\right)\varphi_n(x)$$

Es ist sinnvoll, eine neue Variable einzuführen:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x$$

$$\Rightarrow \hat{b}\, \varphi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) \varphi_n(\xi)$$

analog:

$$\hat{b}^{+} \varphi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) \varphi_n(\xi)$$