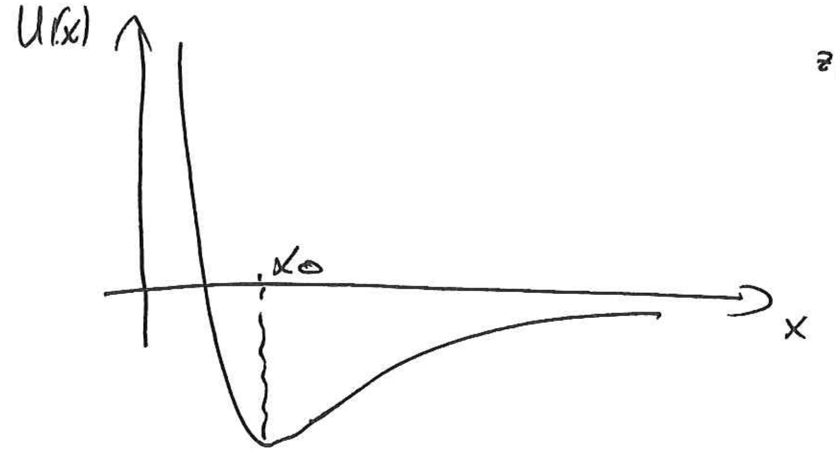
6.3 Harmonischer Oszillator

Als letztes Beispiel betrachten wir den harmonischen Oszillator. Man kann ihn als das Arbeitsschwein (working horse) der Quantentheorie betrachten:

Sei ein beliebiges Potential gegeben,



z.B. van der Waals

Um das Minimum x_0 gilt

$$U(x) = U(x_0) + \frac{1}{2} U''(x_0)\,(x-x_0)^2 + O((x_0-x_0)^3)$$

Wenn wir also nah genug am Minimum sind, können wir das Potential mit $(x \to x - x_0)$

$$\boxed{V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2} \qquad (6.38)$$

beschreiben. Der Hamiltonoperator ist dann

$$\hat{H} = \hat{p}^2/_{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \qquad (6.37)$$

Das durch $\hat{H}$ gegebene quantenmechanische Problem lässt sich leicht mit Auf- und Absteigeoperatoren lösen: Wir definieren

$$\underset{\text{Absteige op}}{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right)$$

$$\underset{\text{Aufsteige op}}{a^+} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\,\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right) \qquad (6.38)$$

mit der Vertauschungsrelation

$$\boxed{[a, a^+] = 1} \qquad (6.39)$$

die mit $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ folgt. Es gilt mit Gl.

$$\hat{H} = \hbar\omega\left[\underbrace{a^+ a}_{n} + 1/2\right] \qquad (6.40)$$

wg

$$a^+ a = \frac{1}{2\hbar}\left(m\omega\, \hat{x}^2 + \frac{1}{m\omega}\hat{p}^2 + i[\hat{p}, \hat{x}]\right)$$
$$= \frac{1}{2\hbar}\left(m\omega\, \hat{x}^2 + \frac{1}{m\omega}\hat{p}^2\right) - \frac{1}{2} \qquad (6.34)$$

Der Operator

$$\hat{n} = a^+ a \qquad (6.35)$$

wird, je nach Anwendung, auch Teilchenzahl op. genannt. Die Energieeigenwerte/Funkt. sind solche von n. Zur Diagonalisierung von n bemerken wir mit Gl. , daß

$$[\hat{n}, a] = -a \; ; \; [\hat{n}, a^+] = a^+ \qquad (6.36)$$

mit

$$[a^+ a, a] = a^+[a,a] + \underbrace{[a^+, a]}_{-1} a = -a$$

Damit lassen sich sehr einfach die Eigenwerte von $\hat{H}$, bzw von $\hat{n}$, bestimmen.

Sei $|\varphi_n\rangle$ dann ein normierter Eigenvekt. von $\hat{n}$ mit Eigenwert λ_n:

$$\hat{n}\,|\varphi_n\rangle = \lambda_n\,|\varphi_n\rangle \quad , \quad \langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = 1 \tag{6.41}$$

Dann ist auch $a^+|\varphi_n\rangle$ ein Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda_n + 1$:

$$\hat{n}\,a^+|\varphi_n\rangle \underset{(\quad)}{=} a^+ \underbrace{n|\varphi_n\rangle}_{\lambda_n|\varphi_n\rangle} + a^+|\varphi_n\rangle = (\lambda_n+1)\,a^+|\varphi_n\rangle \tag{6.42}$$

Die Normierung von $a^+|\varphi_n\rangle$ folgt mit

$$\begin{aligned}\langle\varphi_n|a\,a^+|\varphi_n\rangle &= \langle\varphi_n|\,\hat{n} + [a,a^+]\,|\varphi_n\rangle \\ &= (\lambda_n+1)\,\underbrace{\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle}_{1} = (\lambda_n+1)\end{aligned} \tag{6.43}$$

und damit

$$\boxed{|\varphi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda_n+1}}\,a^+|\varphi_n\rangle} \tag{6.44}$$

Nun gilt analog

$$\boxed{|\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda_n}}\,a\,|\varphi_n\rangle}$$

und außerdem

$$\| a|\varphi_n\rangle \| > 0 \qquad (6.45)$$

Damit muß gelten, daß die EW λ_n nach unten beschränkt sind, $\lambda_n \geq 0$ und der kleinste EW, λ_0, muß verschwinden:

$$\lambda_0 = 0 \Rightarrow a|\varphi_0\rangle = 0, \qquad (6.46)$$

sonst bekommt man $\lambda_{-1}, \lambda_{-2}, \ldots < 0$ 4.

Es folgt

$$\boxed{\lambda_n = n, \quad n \in \mathbb{N}} \qquad (6.47)$$

und

$$\boxed{\hat{H}|\varphi_n\rangle = \hbar\omega(n + 1/2)|\varphi_n\rangle}$$

$|\varphi_0\rangle$ ist der Grundzustand (Vakuum) mit der kleinsten Energie, $E_0 = \hbar\omega/2$. Die Energieeigenw. sind

$$\boxed{E_n = \hbar\omega(n + 1/2)} \qquad (6.48)$$

Die Zustände $|\varphi_n\rangle$ lassen sich mit Gl. (6.44) aus $|\varphi_0\rangle$ erzeugen,

$$\boxed{|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\, a^{+\,n} |\varphi_0\rangle} \tag{6.49}$$

und sind orthonormiert ($\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = 1$ & $\varphi_n \perp \varphi_m$ für $n \neq m$).

Die Energieeigenfunktion (Ortsdarstellung)

$$\varphi_0(x) = \langle x|\varphi_0\rangle \tag{6.50}$$

erfüllen die Differentialgleichung

$$a\,\varphi_0(x) = \langle x|a|\varphi_0\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\underbrace{\sqrt{\tfrac{m\omega}{\hbar}}\,x}_{z} + \frac{d}{d\underbrace{\sqrt{\tfrac{m\omega}{\hbar}}\,x}_{z}}\Big)\varphi_0(x) = 0 \tag{6.51}$$

oder

$$\Big(z + \frac{d}{dz}\Big)\underbrace{\phi_0(z)}_{\varphi_0(x)} = 0 \tag{6.52}$$

mit der Lösung

$$\boxed{\phi_0(z) = \Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{1/4} e^{-z^2/2}} \tag{6.53}$$

Normierung

Die Normierung folgt aus

$$1 = \int_{\mathbb{R}} dx \, |\phi_0(z)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int dx \, e^{-1/2 \frac{m\omega}{\hbar} x^2} \tag{6.54}$$

Mit Gl. (6.53) folgen alle Energieeigenfkt.

$$\phi_n(z) = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}}_{A_n} \underbrace{\left(z - \frac{d}{dz}\right)}_{a^+}^{n} e^{-z^2/2}$$

$$= A_n \left[-e^{z^2/2} \frac{d}{dz} e^{-z^2/2}\right]^n e^{-z^2/2}$$

$$= (-1)^n A_n \, e^{z^2/2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2/2} \tag{6.55}$$

und damit

$$\boxed{\phi_n(z) = \bar{A}_n H_n(z) \, e^{-z^2/2}}$$

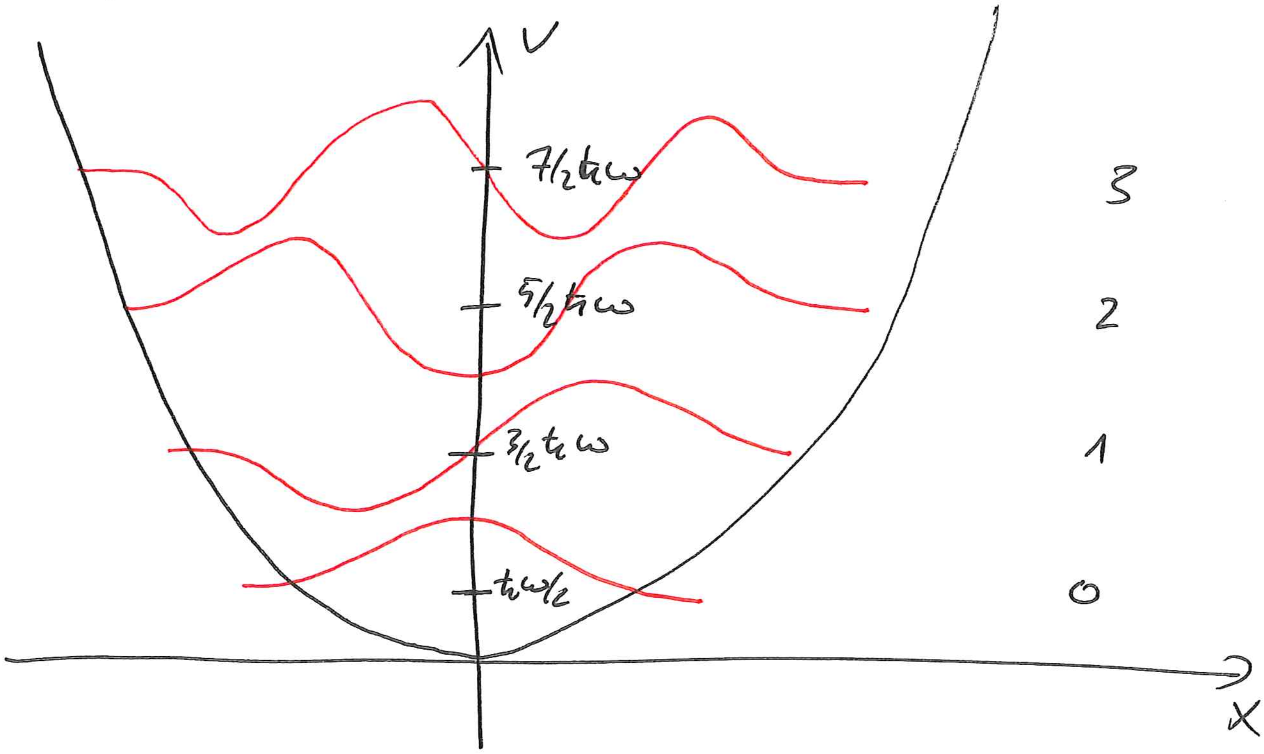
mit

$$\boxed{H_n(z) = \left(e^{z^2} \cdot \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}\right), \quad \bar{A}_n = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!}}} \tag{6.56}$$

H_n: Hermitesche Polynome

$$H_0 = 1, \quad H_2 = (2z)^2 - 2, \quad \ldots$$
$$H_1 = 2z, \quad H_3 = (2z)^3 - 6(2z) \tag{6.57}$$

Die H_n sind Polynome n'ten Grades mit n einfachen Nullstellen. Damit ergibt sich folgendes Bild



mit

$$\phi_n(z) = (-1)^n \, \phi_n(-z) \tag{6.58}$$

Da $[\hat{H}, P] = 0$, haben die EF definierte Parität