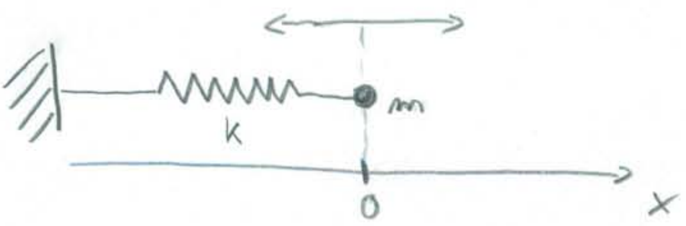
Der quantenmechanische harmonische Oszillator



- Oszillation um Ruhelage $x = 0$
- lineare Rückstellkraft
- Oszillationsfrequenz unabhängig von Amplitude

m: Masse des Teilchens
k: Federkonstante

- Hook'sches Gesetz (mechanische Rückstellkraft)

$$F_k = -kx$$

- klassische Bewegungsgleichung

$$m \frac{\partial^2}{\partial t^2} x + kx = 0$$

mit Lösung

$$x(t) = A \cos(2\pi \nu t + \phi) \quad \text{mit} \quad \nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$$

$\Rightarrow$ harmonischer Oszillator

Viele physikalische Systeme lassen sich angenähert als harmonische Oszillatoren beschreiben.

- mechanische Oszillatoren
- elektrische Oszillatoren
- Schwingungen in Molekülen
- Gitterschwingungen in Kristallen

Welche physikalischen Systeme verhalten sich wie harmonische Oszillatoren?

Systeme mit nicht linearen Rückstellkräften

- In vielen physikalischen Systemen sind die Rückstellkräfte für grosse Auslenkungen nicht linear. Trotzdem können diese für kleine Auslenkungen häufig linearisiert werden und in guter Näherung als harmonische Oszillatore beschrieben werden.

  - Taylor - Entwicklung einer beliebigen Rückstellkraft F um die Koordinate x_0

$$F(x) = F(x_0) + \left.\frac{\partial F}{\partial x}\right|_{x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 F}{\partial x^2}\right|_{x_0} (x - x_0)^2 + \ldots$$

$$= \sum_i \frac{1}{i!} \left.\frac{\partial^i}{\partial x^i} F\right|_{x_0} (x - x_0)^i$$

- Schrödinger - Gleichung zum harmonischen Oszillator

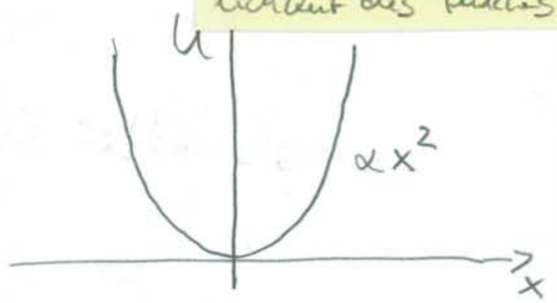
Erwartungen für mögliche Energieen des Systems; Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens?

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V\psi$$

- harmonisches Potential

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

mit $F_k = -\frac{\partial}{\partial x} V = -kx$



⇒ berechne zeitunabhängige Schrödingergleichung

Erwartungen:
- diskrete Energieen E_n
- $E_0 \neq 0$ im Grundzustand

- zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}u + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 u = E u \qquad \text{mit } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

– ausgedrückt in dimensionslosen Einheiten $\tilde{x}, \tilde{E}$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\tilde{x} \qquad \tilde{x} \text{ dimensionslose Koordinate}$$

$$E = \hbar\omega\,\tilde{E} \qquad \tilde{E} \text{ dimensionslose Energie}$$

mit $\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \tilde{x}} = \frac{\partial u}{\partial \tilde{x}} \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial x}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \frac{\partial u}{\partial \tilde{x}}$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\frac{\hbar}{m\omega} = \frac{\partial^2 u}{\partial \tilde{x}^2}$$

folgt durch Substitution die dimensionslose Schrödinger-Gleichung

$$\boxed{\frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2}u + \tilde{x}^2 u\right) = \tilde{E}u} \Leftrightarrow \tilde{H}u = \tilde{E}u$$

⇒ Finde Eigenfunktionen und Eigenwerte des normierten Hamilton-Operators $\frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \tilde{x}^2\right) = \tilde{H}$

- Umschreiben des Hamilton-Operators mittels Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren b^+ und b

$$\left.\begin{aligned} b^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + \tilde{x}\right) \\ b &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + \tilde{x}\right) \end{aligned}\right\} \quad \boxed{b^+ b = \tilde{H} - \frac{1}{2}}$$

- Schrödingergleichung ausgedrückt in b^+ und b

$$\underbrace{b^+ b}_{\text{Operator}} u = \left(\tilde{H} - \frac{1}{2}\right) u = \underbrace{\left(\tilde{E} - \frac{1}{2}\right)}_{\text{Eigenwert}} u$$

- löse Eigenwertgleichung

$$\boxed{b^+ b\, u_n = n\, u_n}$$

⇒ hier $n = \tilde{E} - \frac{1}{2}$ → $\boxed{E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)}$

- Nebenrechnung: Betrachte Kommutatoren von b^+ und b

$$[b^+, b] = b^+ b - b b^+ = -1$$

$$[b, b^+] = b b^+ - b^+ b = 1$$

- u_n sei Lösung der Schrödinger-Gleichung. Wende b auf Schrödinger-Gleichung an

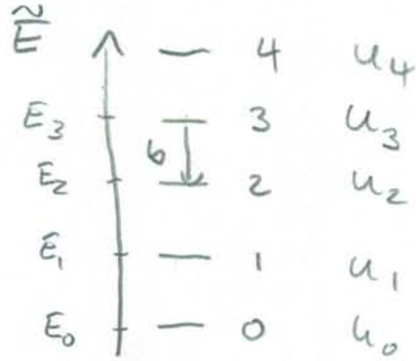
$$\underbrace{b\,(b^+}_{= b^+ b + 1} b\, u_n) = b\,(n u_n)$$

$$\Leftrightarrow (b^+ b)\, b u_n = \underbrace{(n-1)}_{\text{neuer Eigenwert}} \underbrace{b u_n}_{\text{neue Eigenfunktion}}$$

- Folgerungen: - Ist u_n Eigenfunktion zum Eigenwert n so ist auch $b u_n$ Eigenfunktion zum Eigenwert $n-1$

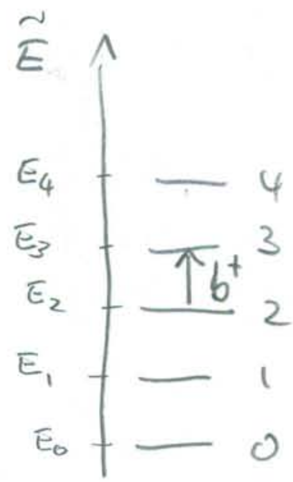
  - b wird daher **Vernichtungsoperator** genannt.

$\Rightarrow$ Energieniveaudiagramm



- Analog: Wende b^+ auf Schrödinger-Gleichung an

$$b^+(\underbrace{b^+ b}_{= b b^+ - 1} u_n) = b^+(n u_n)$$



$$\Leftrightarrow (b^+ b)\, b^+ u_n = \underbrace{(n+1)}_{\text{neuer Eigenwert}}\ \underbrace{b^+ u_n}_{\text{neue Eigenfunktion}}$$

- Ist u_n eine Eigenfunktion zum Eigenwert n so ist $b^+ u_n$ eine Eigenfunktion zum Eigenwert $n+1$

- b^+ wird der **Erzeugungsoperator** genannt

Berechnung der Eigenfunktionen

Annahmen: – die Schrödingergleichung habe nur positive Energieeigenwerte $E > 0$

– es gibt eine Eigenfunktion u_0, die zur niedrigsten Energie $E_0 - \frac{1}{2} = 0$ gehört

es folgt: $b\, u_0 = 0$ mit $n = 0$ und $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} u_0 + \tilde{x}\, u_0 = 0$$

$$\Leftrightarrow \int \frac{du_0}{u_0} = - \int \tilde{x}\, d\tilde{x}$$

$$\Rightarrow \boxed{u_0 = c\, e^{-\frac{1}{2}\tilde{x}^2}}$$ niedrigste Eigenfunktion

• Alle weiteren u_n lassen sich durch Anwendung von b^+ erzeugen

$$\left(b^+\right)^n u_0 = u_n$$

z.B. $$u_1 = \left(-\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + \tilde{x}\right) c\, e^{-\frac{1}{2}\tilde{x}^2}$$

$$\sim \tilde{x}\, e^{-\frac{1}{2}\tilde{x}^2}$$ u.s.w.

– für die Eigenwerte folgt

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$$

- allgemein folgt für die Lösungen

$$u_n = e^{-\frac{1}{2}\tilde{x}^2} H_n(\tilde{x})$$

mit $H_n(\tilde{x}) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n}} e^{\tilde{x}^2} \frac{d^n}{d\tilde{x}^n} e^{-\tilde{x}^2} \frac{1}{\sqrt{n!\sqrt{\pi}}}$

<u>Hermite - Polynome</u>

- und in gewöhnlichen Ortskoordinaten

$$u_n = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar}} \exp\left(-\frac{1}{2} x^2 \frac{m\omega}{\hbar}\right) H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$

Zeige berechnete Wellenfunktionen in MMA.
- Wo ist für $n=0$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeit am grösste?