2. Harmonischer Oszillator

2.1. Eigenwertproblem

harmonische Oszillatoren als Beispiel für verschiedene Systeme: Licht, Molekülschwingungen etc.

Masse m, Frequenz ω, eindimensional

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - \frac{k}{2} x^2 \xrightarrow[\text{Mechanik}]{\text{klassische}} H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

Quantentheorie: $\underline{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ und $\underline{x} = x \Longrightarrow \underline{H}$

neue Operatoren a, a^+ zur Lösung: Liko von Ort / Impuls

$$\left.\begin{matrix} a \\ a^+ \end{matrix}\right\} = \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} \underline{x} \pm i \left(\frac{1}{m\omega\hbar}\right)^{1/2} \underline{p} \right) \right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x \pm \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \frac{d}{dx} \right\}$$

a) Vertauschungsrelation:

ü A

$$a a^+ - \underline{\underline{a^+ a}} = \underline{\underline{[a, a^+]}} = \frac{i}{\hbar}[p, x] = \underline{\underline{1}}$$

b) Hamiltonian in Erzeugern und Vernichtern

$$a^+ a = \frac{1}{\hbar\omega}\Big(\underbrace{\frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \frac{p^2}{2m}}_{\underline{H}} - \frac{1}{2}\hbar\omega\Big)$$

umstelle nach $\underline{H}$:

$$\boxed{\underline{H} = \hbar\omega\left(a^+ a + \frac{1}{2}\right)}$$

Darstellg. d. H in Leiteroperatoren a^+, a

(Begründg. später)

c) Eigenwertproblem:

viele λ's

erster Schritt: $\underbrace{a^+ a}_{\text{Operator}} \underbrace{u_\lambda(x)}_{\text{EF}} = \underbrace{\lambda}_{\text{EW}} \underbrace{u_\lambda(x)}_{\text{EF}}$

λ, u sind gesucht.

(i) $\lambda \geq 0$, d.h. positives Spektrum:

$$\lambda = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\; u_\lambda^*(x)\, \underbrace{a^+ a\; u_\lambda(x)}_{\lambda u_\lambda} = \lambda \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |u_\lambda(x)|^2}_{=1} = \lambda$$

$a^+(x, \frac{d}{dx})$

$$\lambda = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(u_\lambda^*(x) \overbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x - \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \frac{d}{dx}\right\}}^{a^+} a\, u_\lambda(x)\right)$$

partielle Integration

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \;\underbrace{a\, u_\lambda^*(x)}_{(a\, u_\lambda(x))^*}\; a\, u_\lambda(x)$$

$$\lambda = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |a\, u_\lambda(x)|^2 \geq 0$$

$$\lambda \geq 0$$

Die Eigenwerte von $a^+ a$ sind ≥ 0!

(ii) welche λ's kommen in Frage?

wenn u_λ EF zu EW λ ist $(a^+ a\, u_\lambda = \lambda u_\lambda)$, so

$\Downarrow$

$a^+ u_\lambda$ auch EF zu $\lambda + 1$ $\left(a^+ a\, (\underline{a^+ u_\lambda}) = (\lambda+1) \underline{a^+ u_\lambda} \right)$

Behauptg.

<u>weil</u>:

$$\underline{a^+ a\, (a^+ u_\lambda)} = a^+ \underbrace{a\, a^+}\, u_\lambda$$

verwenden:

$a a^+ - a^+ a = 1$

$$= a^+ (1 + a^+ a)\, u_\lambda = a^+ u_\lambda + a^+ \underbrace{a^+ a\, u_\lambda}_{\lambda u_\lambda}$$

$$= a^+ \underbrace{(1+\lambda)}\, u_\lambda = \underline{(1+\lambda)\, a^+ u_\lambda}$$

also ist $a^+ u_\lambda$ EF zum EW $\lambda+1$

wenn man das μ-mal macht

$$\boxed{\begin{aligned} (a^+)^\mu\, u_\lambda &= u_{\lambda+\mu} \\ a^+\, u_\lambda &= u_{\lambda+1} \end{aligned}}$$

analoge Rechng.:

$$\boxed{\begin{aligned} a^{\mu}\, u_{\lambda} &= u_{\lambda-\mu} \\ a\, u_{\lambda} &= u_{\lambda-1} \end{aligned}}$$

Der Unterschied zwischen den λ's ist $\Delta\lambda = \pm 1$

(iii) Die Folge $a\,u_\lambda,\ a^2 u_\lambda,\ a^3 u_\lambda \ \cdots\ a^{\mu} u_\lambda$

muß <u>abbrechen</u>, denn irgendwann wird $\lambda - \mu < 0$

z.B $\lambda = 10$ $\mu = 11$ erzeugt $\lambda = -1$ und darf

<u>nicht</u> existieren.

<u>fordern!</u> $a\, u_0(x) \overset{!}{=} 0$ Def gl. für $u_0(x)$

dann erfüllt $a^2\, u_0(x) = 0$

$$\underbrace{a^+ a \, u_0(x) = 0 \cdot u_0(x)}$$

Eigenwertgleichg. f. u_0 zum Eigenwert 0.

$$\boxed{\begin{array}{l}\text{Der kleinste Eigenwert } \lambda = 0. \\ \text{weil } \Delta\lambda = \pm 1 \text{ sind alle } \lambda \text{ geg. durch die} \\ \text{natürlichen Zahlen: } 0, 1, 2, 3, 4 \ldots\end{array}}$$

(iv) Zustände:

$$u_n(x) = \alpha_n (a^+)^n u_0(x) \qquad \alpha_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}$$

→ üA

allerdings müssen diese Zustände <u>normiert</u>

$$\boxed{u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n u_0(x)}$$

(v) Bestimmg. von $u_0(x)$:

$$a \, u_0(x) = 0$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x + \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}\frac{d}{dx}\right) u_0(x) = 0$$

Diff. tiel gl. 1. Ordng f. $u_0(x)$: Trenng. d. Variablen

$$\boxed{u_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}$$

Der niedrigste Zustand d. Oszillators ist Gaußkurve.

typische Ausdehnung $\underbrace{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}_{\ell} \rightarrow e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\ell}\right)^2}$

d) Zusammenfassg. der Ergebnisse ($\underline{H}$)

EF : $u_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^+\right)^n u_0(x)$

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

$(n : 0, 1, 2, 3 \ldots)$

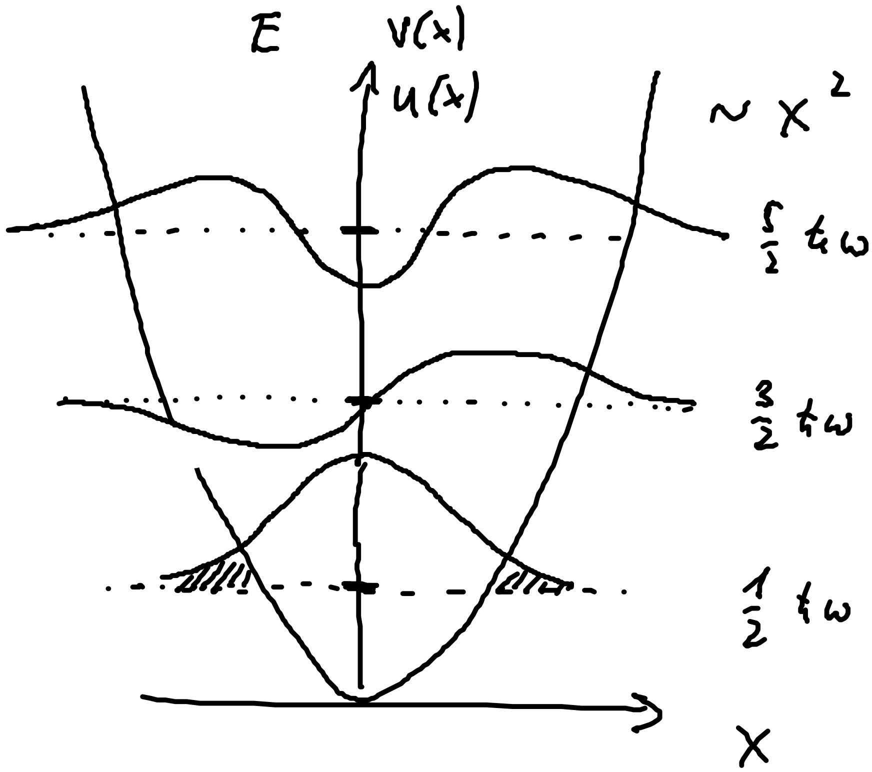
$$\underline{H}\, u_n = \varepsilon_n u_n$$

Grundzustand: $u_0 \propto e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\ell}\right)^2}$, $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

Gaußkurve — Nullpunktenergie

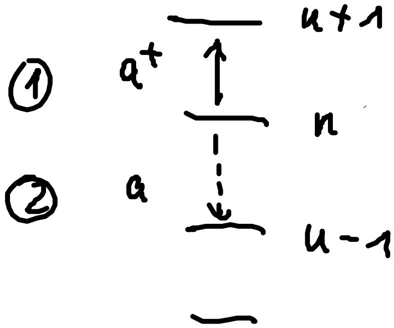
u_n können rekursiv bestimmt werden:

u_n sind die Hermitepolynome ÜA



e) Interpretation

a^+, a nennt man Leiteroperatoren, weil sie auf Zustands<u>leiter</u> zwischen verschied. Zuständen „schalten" können



n Quanten (u_n)

(1)
$$a^+ u_n = a^+ \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n u_0$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^{n+1} u_0$$

$$= \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} (a^+)^{n+1} u_0$$

$$a^+ u_n = \sqrt{n+1}\; u_{n+1}$$

erzeugt 1 Quant mehr „Erzeugeroperator"

(2)
$$a\, u_n = \sqrt{n}\; u_{n-1}$$

vernichtet 1 Quant „Vernichtungsoperator"

$a^\dagger a$ nennt man Teilchenzahloperator
(Quanten)

$$a^\dagger a \; u_n = n \; u_n$$

Teilchenzahl / Quantenzahl die angeregt ist

2.2. Einige vorweggenommene Anwendungen

große Vielzahl v. Quantenanregg. werden durch harmonische Osz. beschrieben

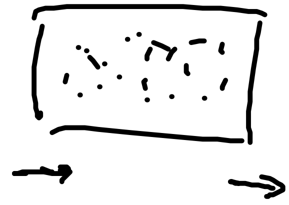
atomare Systeme:

- Molekülschwingg. 

  $\rightarrow$ Normalschwingg. $\xrightarrow{\text{quantisiert}}$ „Vibronen"

- Festkörperion 

  $\rightarrow$ Normalschwingg. $\xrightarrow{\text{quantisiert}}$ „Phononen"

• Elektronengase 

→ kollektive El-Schwingg. $\xrightarrow[q.]{}$ „Plasmonen"

Feldern

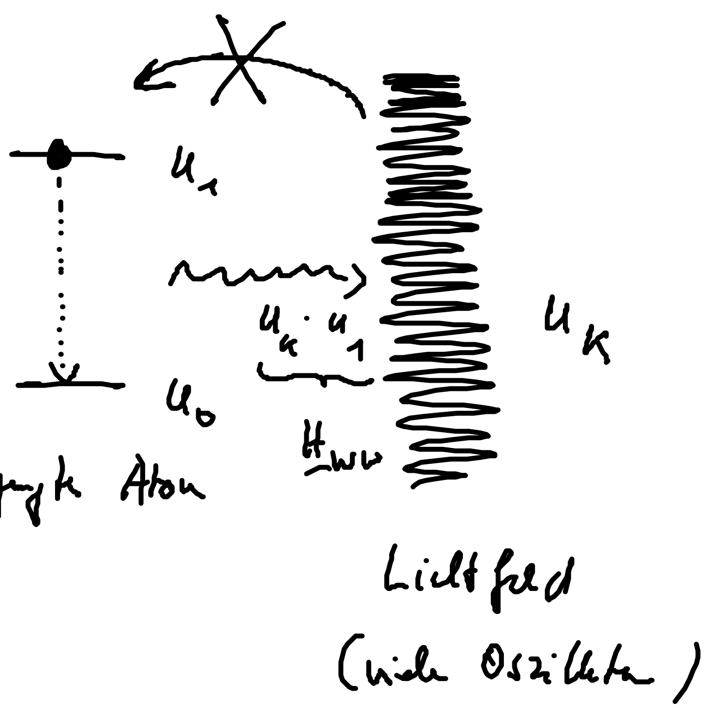
Erzeuger / Vernichter formalismus ermöglicht ein einheitliche Schreibweise f. Felder + Teilchen

(Gravitationsfeld, elektromagn. Feld, Schrödingerfeld)

Wechselwirkung v. Feldern

wird als WW von Oszillatoren beschrieben

z.B.

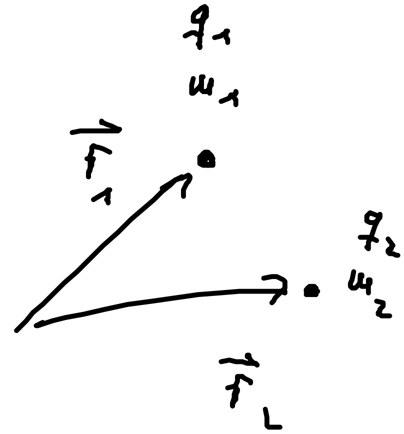


3. Zweikörperproblem

2 Teilchen + Coulomb WW im freien Raum

(Zweikörperproblem analog Planetenbewegg.)

3.1. Schwerpunkt und Relativkoordinaten



Hamiltonfunktion:

$$H = \frac{\vec{P}_1^{\,2}}{2m_1} + \frac{\vec{P}_2^{\,2}}{2m_2} + V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

Coulomb WW oder eine andere WW

Relativ und Schwerpunktkoordinaten:

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad , \quad \vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$$

$$\vec{p} = \frac{m_2 \vec{P}_1 - m_1 \vec{P}_2}{m_1 + m_2} \quad , \quad \vec{\Pi} = \vec{P}_1 + \vec{P}_2$$

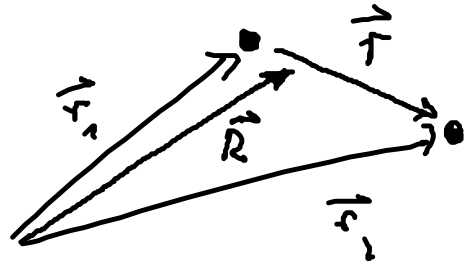
Relativkoord. Schwerpkt koord.

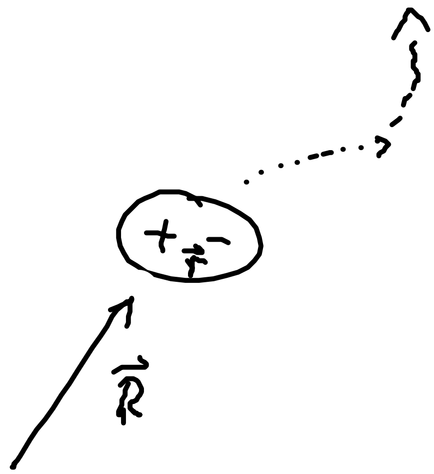
einsetzen in H

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2\mu} + \frac{\vec{\Pi}^{\,2}}{2M} + V(r)$$

μ = reduzierte Masse : $\frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$, M = Gesamtmasse : $m_1 + m_2$

<u>Bsp</u> : H - Atom





$H \rightarrow \underline{H}$