1.8 One dimensional harmonic Oscillator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \tfrac{1}{2} m\omega^2 x^2 \qquad \hat{H}\,\varphi = E\,\varphi$$

$$E_n = (n + 1/2)\,\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad \text{energy eigenvalues}$$

$$\varphi_n(x) = e^{-\beta x^2} \underbrace{\sum_{\mu=0}^{n} c_\mu x^\mu}_{f_n(x)} \qquad \text{Ansatz for the eigenfunctions} \qquad \beta = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

with

$$f_n'' - 4\beta x f' + \left(\frac{2m}{\hbar^2} E_n - 2\beta\right) f_n = 0$$

Eigenfunktionen:

$$\varphi_n(x) = e^{-\beta x^2} \underbrace{\sum_{\mu=0}^{n} c_\mu x^\mu}_{f_n(x)}$$

$f_n(x)$ Polynom von Grad n

$$f_n(x) = A_n H_n(\sqrt{2\beta}\, x)$$

A_n Normierungsfaktor

$H_n(\xi)$ Hermitesche Polynom mit $\xi = \sqrt{2\beta}\, x$

Die $H_n(\xi)$ gehorchen der DGL:

$$\boxed{H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2n H_n(\xi) = 0} \qquad *$$

(wegen $\frac{df_n}{dx} = A_n \sqrt{2\beta}\, \frac{dH_n}{d\xi}$, $\frac{d^2 f_n}{dx^2} = A_n\, 2\beta\, \frac{d^2 H_n}{d\xi^2}$ folgt

dies aus $$f_n'' - 4\beta x_n f_n' + \underbrace{\left(\frac{2m}{\hbar^2} E_n - 2\beta\right)}_{2\beta(2n+1)} f_n = 0 \qquad \beta = \frac{m\omega}{2\hbar}, \quad E_n = \hbar\omega(n + \tfrac{1}{2})$$

$$f_n'' - 4\beta x f_n' + 4\beta n f_n = 0$$

$$2\beta H_n'' - 4\beta \xi H_n' + 4\beta n H_n = 0$$

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2n H_n = 0 \quad \square \quad)$$

Für $H_n(\xi) = \sum_{\mu=0}^{n} a_\mu \xi^\mu$ gilt

$$a_{\mu+2}(\mu+2)(\mu+1) - a_\mu(2\mu - 2n) = 0$$

Also $$a_{\mu+2} = a_\mu \frac{2(\mu-n)}{(\mu+2)(\mu+1)}$$ rekursive Beziehung

n gerade : a_0 aus der Normierung, $a_1 = 0$
n ungerade : $a_0 = 0$, a_1 aus der Normierung

Einfacher ist die Berechnung durch

$$\boxed{H_n(\xi) := (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}}$$

(Das ist äquivalent zu *

$$H_n'(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2}\left(2\xi \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} + e^{\xi^2} \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} e^{-\xi^2}\right)$$

$$= 2\xi H_n - H_{n+1}$$

$$H_n''(\xi) = 2H_n + 2\xi H_n' - H_{n+1}' \underset{\uparrow}{=} 2\xi H_n' - 2n H_n$$

mit $H_{n+1}' = 2(n+1) H_n$

Bleibt also zu zeigen $H_n' = 2n H_{n-1}$

Leibniz produkt regel $\frac{d^n}{dx^n}(u \cdot v) = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{n}{k} u^{(k)} v^{(n-k)}$)

$H_0(\xi) = 1$
$H_1(\xi) = 2\xi$
$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$
$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$
$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$

Parität : $$H_n(-\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d(-\xi)^n} e^{-\xi^2} = (-1)^n H_n(\xi)$$

gerade, falls n gerade
ungerade, falls n ungerade

Orthonormierung

Eigenfunktionen sind orthogonal d.h. $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi_n(x)\, \varphi_m(x) = 0$ für $n \neq m$

$\hat{H} \varphi_n = E_n \varphi_n$ mit $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \varphi_m(x) \cdot \hat{H} \cdot \varphi_n(x) = E_n \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \varphi_m(x)\ \varphi_n(x) \qquad (1)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \varphi_n(x)\ \hat{H}\ \varphi_m(x) = E_m \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \varphi_m(x)\ \varphi_n(x) \qquad (2)$$

(1) − (2)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \varphi_m(x) \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \varphi_n(x) - \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \varphi_n(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \varphi_m(x)$$

$$= (E_n - E_m) \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \varphi_n(x)\ \varphi_m(x)$$

mit 2x partieller Integration

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \varphi_m \varphi_n'' = \underbrace{\varphi_m \varphi_n' \Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{0} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \varphi_m'\ \varphi_n'$$

$$= \underbrace{-\varphi_m' \varphi_n \Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{=0} + \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \varphi_m''\ \varphi_n$$

folgt

$$0 = (E_n - E_m) \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \varphi_n(x)\ \varphi_m(x)$$

Also $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \varphi_n(x)\ \varphi_m(x) = 0$ für $n \neq m$

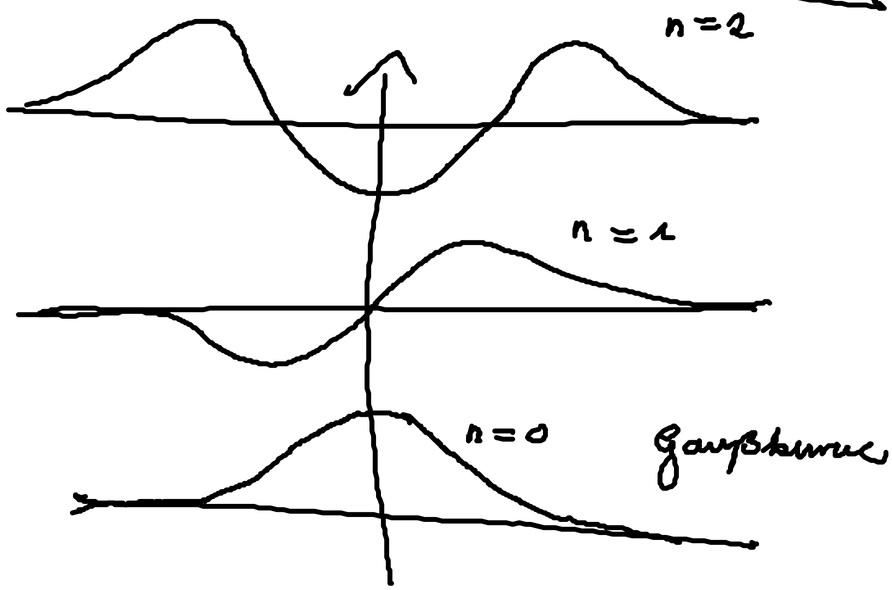
(ohne Entartung $E_n \neq E_m$ für $n \neq m$)

$$1 \stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \varphi_n^2(x) = A_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \exp\{-2\beta x^2\}\, H_n^2(\sqrt{2\beta}\, x)$$

$$= \frac{A_n^2}{\sqrt{2\beta}} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, e^{-\xi^2} H_n^2(\xi)}_{2^n n! \sqrt{\pi}}$$

(ohne Beweis)

Also
$$\boxed{\varphi_n(x) = \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\, e^{-\beta x^2} H_n(\sqrt{2\beta}\, x)} \qquad \beta = \frac{m\omega}{2\hbar}$$



Vergleich mit der klassischen Lösung

Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Intervall dx:

- quantenmechanisch

$$|\varphi_n(x)|^2 dx = \sqrt{\frac{2\beta}{\pi}}\, \frac{1}{2^n n!}\, e^{-2\beta x^2} H_n^2(\sqrt{2\beta}\, x)\, dx$$

- klassisch

Geschwindigkeit v

Aufenthaltsdauer in Intervall dx: $\quad dt = \frac{dx}{v}$

Aufenthaltswahrscheinlichkeit in dx während einer halben Periode $T/2$

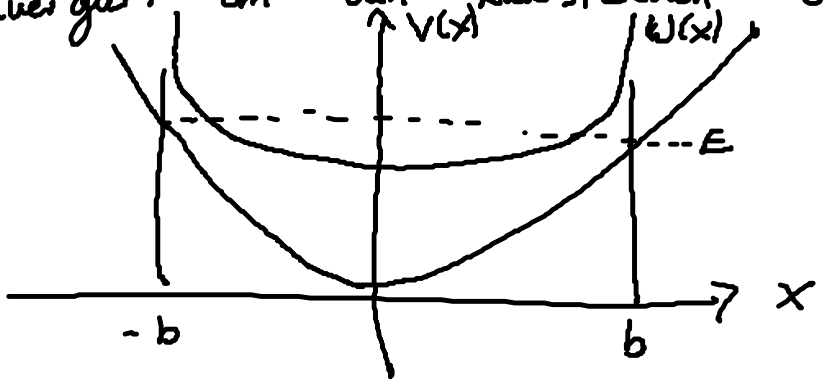
$$W(x) = \frac{dt}{\underbrace{T/2}_{\text{Gesamtzeit}}} = \frac{dx}{v \cdot \frac{T}{2}} = \frac{\omega}{v\pi}\, dx \qquad \omega = \frac{2\pi}{T}$$

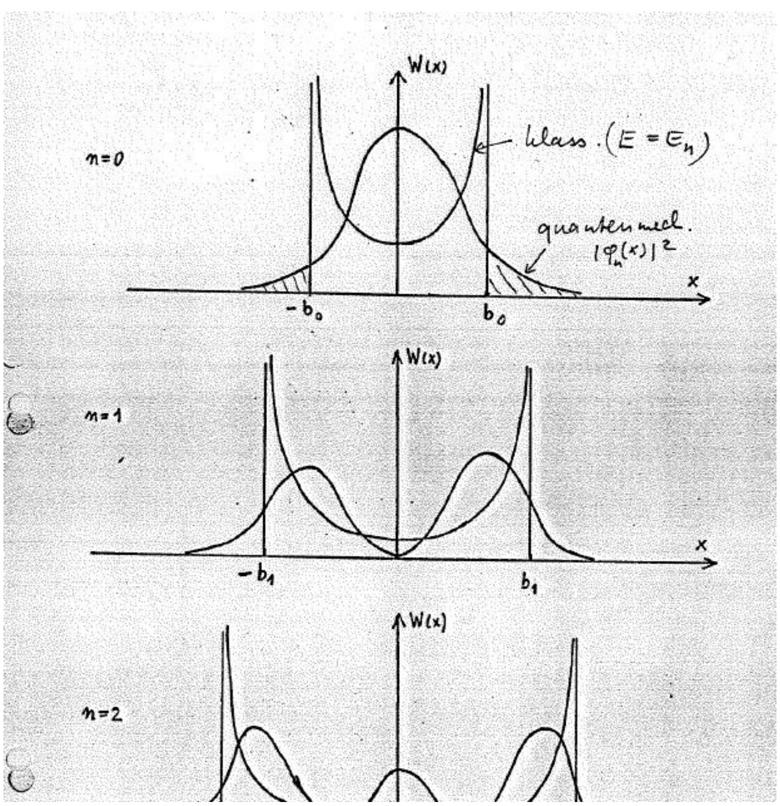
Energieerhaltungssatz

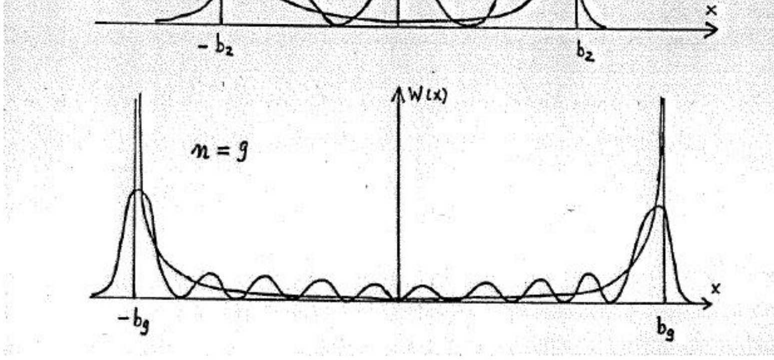
$$E = \frac{m}{2} v^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad \Rightarrow \quad v = \sqrt{\frac{2E}{m} - \omega^2 x^2}$$

$$\Rightarrow \quad W(x) = \begin{cases} \dfrac{dx}{\pi\sqrt{b^2 - x^2}} & \text{für } |x| \leq b \\ 0 & \text{für } |x| > b \end{cases} \qquad b \equiv \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

divergiert an den klassischen Umkehrpunkten $x = \pm b$







Für $n \to \infty$ $\quad \underbrace{|\varphi_n(x)|^2}_{\text{qm}} \to \underbrace{W(x)}_{\text{klass}}$

(Korrespondenzprinzip)

Allgemeine Lösung des 1-dim harmon. Oszillators

(nicht stationäre Zustände)

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \, e^{-i/\hbar \, E_n t} \, \varphi_n(x)$$

$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ $\qquad \varphi_n(x)$ Eigenfunktion

Spezielle Anfangsverteilung

Wähle $\quad c_n := \dfrac{(a\sqrt{\beta})^n}{\sqrt{n!}} \exp\left(-\dfrac{\beta}{2} a^2\right) \qquad$ (a > 0 beliebig

$$\Rightarrow \psi(x,0) = \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta/2 \, a^2} e^{-\beta x^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a\sqrt{\beta})^n}{n! \sqrt{2^n}} \overbrace{H_n(\sqrt{2\beta}\, x)}^{(-1)^n \frac{e^{2\beta x^2}}{(\sqrt{2\beta})^n} \frac{d^n}{dx^n} e^{-2\beta x^2}}$$

$$= \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta/2 \, a^2} e^{\beta x^2} \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\left(-\frac{a}{2}\right)^n}_{z_0} \frac{1}{n!} \underbrace{\frac{d^n}{dx^n} e^{-2\beta x^2}}_{\left[\frac{d^n}{dz_0^n} e^{-2\beta(x+z_0)^2}\right]_{z_0=0}}$$

$$= \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta/2 \, a^2} e^{\beta x^2} e^{-2\beta(x+z_0)^2}$$

Taylorreihe

$$= \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta a^2/2 + \beta x^2 - 2\beta(x^2 - xa + a^2/4)}$$

$$= \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta(a^2 + x^2 - 2ax)}$$

$\left(2\beta\right)^{1/4} e$

$$= \left(\frac{\ }{\pi}\right) \quad e$$

$$= \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta(a-x)^2} = f_0(x-a)$$

$\hat{=}$ um a verschobenen Grundzustand

Zeitabhängigkeit:

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta/2\, a^2} e^{\beta x^2} \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{e^{-i/\hbar \overbrace{(n+1/2)\hbar\omega}^{E_n} t} \left(-\frac{a}{n}\right)^n}_{e^{-i\frac{\omega}{2}t} \underbrace{\left(-\frac{a}{2} e^{-i\omega t}\right)}_{z}{}^n} \frac{1}{n!} \frac{d^n}{dx^n} e^{-2\beta x^2}$$

$$= \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta/2\, a^2} e^{\beta x^2} e^{-2\beta(x+z)^2} e^{-i\omega/2\, t} \qquad \text{vergl. } \psi(x,0)$$

$$= \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta\frac{a^2}{2} + \beta x^2 - 2\beta\left(x^2 - x a e^{-i\omega t} + \frac{a^2}{4} e^{-2i\omega t}\right)} \cdot e^{-i\omega/2\, t}$$

$$= \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta\left(x^2 - 2xa(\cos\omega t - i\sin\omega t) + \frac{a^2}{2}\left(\underbrace{1+\cos 2\omega t}_{2\cos^2\omega t} - i\sin 2\omega t\right)\right)} \cdot e^{-i\frac{\omega}{2}t}$$

$$= \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/4} \cdot e^{-\beta(x - a\cos\omega t)^2} \cdot e^{-i\left[\beta\left(2xa\sin\omega t - \frac{a^2}{2}\sin 2\omega t\right) + \frac{\omega}{2}t\right]}$$

Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit:

$$|\psi(x,t)|^2 = \left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{1/2} e^{-2\beta(x - a\cos\omega t)^2}$$

Das ist ein gaußsches Wellenpaket, dessen Maximum mit $x_0(t) = a\cos\omega t$ oszilliert. Es bewegt sich also wie ein klassisches Teilchen im Oszillatorpotential zur Anfangsbedingung $x(0) = a$, $\dot{x}(0) = 0$.

Dieser Zustand ist kein Energie-Eigenzustand
(d.h. kein stationärer Zustand mit fester Energie),
sondern ein nicht-stationärer Zustand mit fester Phase
des Oszillators, wie im klass. Fall.
(er heißt <u>kohärenter Zustand</u> oder <u>Glauber Zustand</u>)

Roy Glauber
(Nobelpreis 2005 für die Begründung der Quantenoptik):
Phys. Rev. 130, 2529 (63)
" " 131, 2766 (63)
Phys Rev. Lett. 10, 84 (63)

Quantentheorie der Strahlung: kohärenter Zustand
(Laserlicht: feste Phase, Photonenzahl unbestimmt)

⟷ thermische Strahlung (Phase unbestimmt, feste Photonenanzahl)

Phys. Journal <u>4</u> (Dez 2005), 21