

⑦ Harmonischer Oszillator

Klassische Mechanik:

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}, \quad \{p, q\} = 1, \quad \{p, p\} = \{q, q\} = 0$$

Bewegungsgleichungen:

$$\dot{p} = \{H, p\} = -m\omega^2 q, \quad \dot{q} = \{H, q\} = \frac{p}{m} \quad (\text{so daß } \ddot{q} = -\omega^2 q)$$

Lösung:

$$\begin{cases} p(t) = p_0 \cos \omega t - m\omega q_0 \sin \omega t \\ q(t) = q_0 \cos \omega t + \frac{p_0}{m\omega} \sin \omega t \end{cases}$$

Komplexe Form:

$$z = \frac{1}{\sqrt{2m}} (\omega q + \frac{ip}{m}), \quad \bar{z} = \frac{1}{\sqrt{2m}} (\omega q - \frac{ip}{m}),$$

dann $\{z, \bar{z}\} = \frac{i}{m}$, $H(z, \bar{z}) = m\omega |z|^2 \Rightarrow m\omega z \bar{z}$, ← "physikalische" Schreibweise

$$\dot{z} = \{H, z\} = -i\omega z, \quad \dot{\bar{z}} = i\omega \bar{z},$$

und

$$z = e^{-i\omega t} z_0, \quad \bar{z} = e^{i\omega t} \bar{z}_0$$

Quantenmechanik:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}$$

in der Koordinatendarstellung mit $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}$$

In folgende setzen wir einfachheitshalber $m=1$:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{\omega^2 q^2}{2}$$

Die Quantenanaloga für z, \bar{z} sind die Operatoren

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\omega\hbar}} (\omega Q + iP), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\omega\hbar}} (\omega Q - iP)$$

Sie sind definiert auf $W^{1,2}(\mathbb{R}) \cap \widehat{W}^{1,2}(\mathbb{R}) = W^{1,2}(\mathbb{R}) \cap \mathcal{F}(W^{1,2}(\mathbb{R}))$ ($W^{1,2} = \{f: f \text{ absolut stetig auf } \mathbb{R}, f, f' \in L^2(\mathbb{R})\}$)

man zeigt: a^* adjungiert zu a , a adjungiert zu a^* ,
 also $a^{**} = a$, a abgeschlossen. Nach einem Satz
 von Neumanns, ist a abgeschlossen und $\overline{D(a)} = \mathcal{H}$,
 so ist a^*a positiv und selbstadjungiert. Aus

$$\{P, Q\}_h = I$$

folgt unmittelbar

$$[a, a^*] = \frac{1}{2\omega h} [\omega Q + iP, \omega Q - iP] = \frac{i}{h} [P, Q] = I$$

auf $W^{2,2}(P) \cap \hat{W}^{2,2}(Q)$. Man kann sogar präziser sein:
 auf diesem Raum gilt:

$$aa^* = \frac{1}{2\omega h} (\omega Q + iP)(\omega Q - iP) = \frac{1}{2\omega h} (P^2 + \omega^2 Q^2) + \frac{i\omega}{2\omega h} [P, Q]$$

$$= \frac{1}{2\omega h} (P^2 + \omega^2 Q^2) + \frac{1}{2} I$$

$$a^*a = \frac{1}{2\omega h} (P^2 + \omega^2 Q^2) - \frac{1}{2} I$$

$$\Rightarrow \boxed{\mu = \omega h (a^*a + \frac{1}{2} I) = \omega h (aa^* - \frac{1}{2} I)}$$

selbstadjungiert nach dem Satz von von Neumann.
 Setze

$$N = a^*a,$$

denn

$$[N, a] = (a^*a)a - a(a^*a) = [a^*, a]a = -a$$

$$[N, a^*] = (a^*a)a^* - a^*(a^*a) = a^*[a, a^*] = a^*$$

Zusammenfassend:

$$\boxed{[N, a] = -a, [N, a^*] = a^*, [a, a^*] = I}$$

Evolutionsgleichungen:

$$\dot{a} = \{H, a\}_h = -i\omega a, \quad (a^*)^\cdot = \{H, a^*\}_h = i\omega a^*$$

$$\Rightarrow a(t) = e^{-i\omega t} a_0, \quad a^*(t) = e^{i\omega t} a_0^* \quad - \text{wie in der klassik.}$$

Spektraleigenschaften von H kann man weitgehend untersuchen, basierend nur auf

$$H = \omega \hbar \left(a^\dagger a + \frac{I}{2} \right) \quad (1)$$

$$H = \omega \hbar \left(a a^\dagger - \frac{I}{2} \right) \quad (2)$$

Wir werden noch die Relation benutzen

$$[a, (a^\dagger)^n] = n (a^\dagger)^{n-1}$$

die leicht per Induktion aus $[a, a^\dagger] = I$ folgt:

$$\begin{aligned} [a, (a^\dagger)^2] &= a(a^\dagger)^2 - a^\dagger a a^\dagger + a^\dagger a a^\dagger - (a^\dagger)^2 a = a[a, a^\dagger] a^\dagger + \\ &+ a^\dagger [a, a^\dagger] = 2a^\dagger, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [a, (a^\dagger)^{n+1}] &= a(a^\dagger)^{n+1} - (a^\dagger)^{n+1} a + (a^\dagger)^n a a^\dagger - (a^\dagger)^n a a^\dagger - (a^\dagger)^n a \\ &= [a, (a^\dagger)^n] a^\dagger + (a^\dagger)^n [a, a^\dagger] = n (a^\dagger)^{n-1} a^\dagger + (a^\dagger)^n \cdot I = \\ &= (n+1) (a^\dagger)^n. \end{aligned}$$

Desweiteren:

$$[H, a] = \omega \hbar (a^\dagger a a - a a^\dagger a) = \omega \hbar [a^\dagger, a] a = -\omega \hbar a$$

$$[H, a^\dagger] = \omega \hbar (a^\dagger a a^\dagger - a^\dagger a^\dagger a) = \omega \hbar a^\dagger [a, a^\dagger] = \omega \hbar a^\dagger$$

Angenommen, hat H mindestens einen Eigenvektor

$$\psi \in D(a^n) \cap D((a^\dagger)^n), \quad n=1, 2, \dots$$

$$H\psi = \lambda\psi.$$

Denn aus $\omega \hbar (a^\dagger a + \frac{I}{2}) \psi = \lambda\psi$ folgt

$$\omega \hbar \|a\psi\|^2 + \frac{\omega \hbar}{2} \|\psi\|^2 = \lambda \|\psi\|^2.$$

Daraus:

$$\Rightarrow \lambda \geq \frac{\omega \hbar}{2}$$

\Rightarrow gilt $a\psi = 0$, so ist $\lambda = \frac{\omega \hbar}{2}$ und ψ der entsprechende Eigenvektor von H .

Aus jedem solchen Eigenvektor lassen sich weitere finden:

$$H a \psi = a H \psi - \omega \hbar a \psi = (\lambda - \omega \hbar) a \psi$$

Also entweder ist $a \psi = 0$ oder ist $a \psi$ ein EV zum EW $\lambda - \omega \hbar$. Ist $a \psi \neq 0$, so entweder ist $a^2 \psi = 0$ oder ist $a^2 \psi$ ein EV zum EW $\lambda - 2\omega \hbar$. So bekommt man eine Folge von EV $a \psi, a^2 \psi, \dots, a^n \psi, \dots$ zu den EW $\lambda - \omega \hbar, \lambda - 2\omega \hbar, \dots, \lambda - n\omega \hbar, \dots$. Die ist allerdings nach unten beschränkt: $\lambda - n\omega \hbar \geq \frac{\omega \hbar}{2}$.

Daher $\exists n_0 \geq 0$ mit $a^{n_0} \psi \neq 0$ und $a^{n_0+1} \psi = 0$.

Setzen wir $\psi_0 = \frac{a^{n_0} \psi}{\|a^{n_0} \psi\|}$, so gilt

$$a \psi_0 = 0 \Rightarrow H \psi_0 = \frac{\omega \hbar}{2} \psi_0$$

Der Vektor ψ_0 beschreibt den Grundzustand des Oszillators, nämlich den Zustand mit der kleinsten möglichen Energie $\frac{\omega \hbar}{2}$.

Wir untersuchen desweiteren die Wirkung von a^\dagger auf die Eigenvektoren von H :

$$H a^\dagger \psi = a^\dagger H \psi + \omega \hbar a^\dagger \psi = (\lambda + \omega \hbar) a^\dagger \psi$$

Es kann nicht sein, dass $a^\dagger \psi = 0$, sonst wäre es ein EV von H zum EW $-\frac{\omega \hbar}{2}$ - Widerspruch. Also

ist $a^\dagger \psi$ ein EV von H zum EW $\lambda + \omega \hbar$. Somit

bekommen wir aus ψ_0 die Folge $a^\dagger \psi_0, (a^\dagger)^2 \psi_0, \dots, (a^\dagger)^n \psi_0, \dots$ von EV zu den EW $\lambda + \omega \hbar, \lambda + 2\omega \hbar, \dots, \lambda + n\omega \hbar, \dots$. Normierung:

$$\begin{aligned} \|(a^+)^n \psi_0\|^2 &= (a^+ (a^+)^{n-1} \psi_0, (a^+)^n \psi_0) = ((a^+)^{n-1} \psi_0, a(a^+)^{n-1} \psi_0) \\ &= ((a^+)^{n-1} \psi_0, (a^+)^n a \psi_0 + n (a^+)^{n-1} \psi_0) = n \|(a^+)^{n-1} \psi_0\|^2 \end{aligned}$$

$$\uparrow \quad (a(a^+)^n) = n(a^+)^{n-1} \quad = \dots = n! \|\psi_0\|^2 = n!$$

Also bekommen wir eine Folge von normierten EV

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n \psi_0 \in \mathcal{H}, \quad n=0,1,\dots$$

von H zu den EW $(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$:

$$H\psi_n = \hbar\omega (n+\frac{1}{2}) \psi_n$$

VL 14, 2.12.2010

Sie sind orthogonal, da H symmetrisch ist.

Setzt man $\mathcal{H}_0 = \{\text{abgeschlossener Untervektorraum von } \mathcal{H} \text{ aufgespannt von } (\psi_n)_{n=0}^{\infty}\}$, so ist $H|_{\mathcal{H}_0}$ wesentlich selbstadjungiert. In der Tat, ist Bild von $(H \pm iJ)|_{\mathcal{H}_0}$ dicht in \mathcal{H}_0 : für jeden

$\psi = \sum_n c_n \psi_n$ finden wir $\varphi = (H + iJ)\varphi$ mit

$$\varphi = \sum_n \gamma_n \psi_n, \quad \gamma_n = \frac{c_n}{\hbar\omega(n+\frac{1}{2}) \pm i}; \quad |\gamma_n| \leq |c_n|.$$

Wir können jetzt die Koordinatendarstellung benutzen, um die Existenz eines Eigenvektors (dann des ψ_0) zu beweisen, sowie $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}$.

Bemerkung. Ist eine Darstellung der Kommutationsrelationen $[a, a^+] = J$ gegeben und ist ψ_0 ein Nullvektor von a , so ist der Hilbertraum $\mathcal{H} = \overline{\text{span}} (\psi_n)_{n=0}^{\infty}$ eine irreduzible Darstellung $\mathbb{C}\langle a, a^+ \rangle$.

der Heisenbergrelationen gegeben, durch

$$Q = (a + a^*) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad P = \frac{(a - a^*)}{i} \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} = \frac{a - a^*}{2i} \sqrt{\frac{2\hbar m\omega}{1}}$$

Dieswegen: gibt es mehr als einen Nullvektor, so ist die Darstellung reduzibel.

In Koordinatendarstellung:

$$\left(\hbar \frac{d}{dq} + \omega q \right) \psi_0 = 0 \Rightarrow \boxed{\psi_0(q) = A e^{-\frac{\omega}{2\hbar} q^2}}$$

$$A = \left(\frac{\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \text{ - Normierungskoeffizient.}$$

$$\begin{aligned} \psi_n(q) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{1}{\sqrt{2\omega\hbar}} \right)^n \left(\omega q - \hbar \frac{d}{dq} \right)^n \psi_0(q) \\ &= P_n(q) e^{-\frac{\omega}{2\hbar} q^2} \text{ bilden eine ONB in } L^2(\mathbb{R}) \end{aligned}$$

Satz. Funktionenfolge $q^n e^{-q^2}$, $n=0,1,2,\dots$ ist in $L^2(\mathbb{R})$ vollständig, d.h.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(q) q^n e^{-q^2} dq = 0, \quad n=0,1,2,\dots \Rightarrow f(q) \equiv 0 \text{ (in } L^2)$$

Beweis. Das Integral $F(z) := \int_{-\infty}^{\infty} f(q) e^{i\operatorname{Re} z q - q^2} dq$ konvergiert absolut $\forall z \in \mathbb{C}$ und definiert daher eine ganze Funktion, mit $F^{(n)}(0) = i^n \int_{-\infty}^{\infty} f(q) q^n e^{-q^2} dq = 0$
 $\Rightarrow F(z) \equiv 0$. Also ist für $g(q) := f(q) e^{-q^2} \in C^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$

$$F(z) \equiv 0 \Rightarrow g = 0. \quad \square$$

Man kann zeigen:

$$\psi_n(q) = \left(\frac{\omega}{\sqrt{\pi\hbar}}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} q\right) e^{-\frac{\omega q^2}{2\hbar}},$$

wobei

$$H_n(q) := (-1)^n e^{q^2} \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2}, \quad \text{die Hermiteschen Polynome sind,}$$

mit Hilfe der Identität

$$\begin{aligned} e^{\frac{q^2}{2}} \frac{d^n}{dq^n} e^{-q^2} &= -\left(q - \frac{d}{dq}\right) \left(e^{\frac{q^2}{2}} \frac{d^{n-1}}{dq^{n-1}} e^{-q^2} \right) \\ &= \dots = (-1)^n \left(q - \frac{d}{dq}\right)^n e^{-\frac{q^2}{2}} \end{aligned}$$

Satz. $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{m\omega^2 q^2}{2}$, der Hamiltonoperator des quantenmechanischen harmonischen Oszillators, ist s.a. mit $D(H) = W^{2,2}(\mathbb{R}) \cap \mathcal{F}(W^{2,2}(\mathbb{R}))$. Er hat ein Punktspektrum:

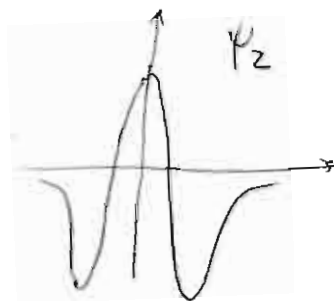
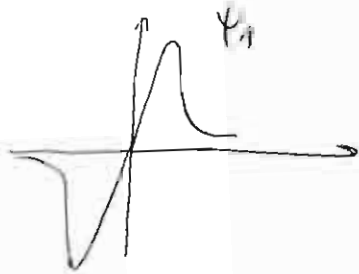
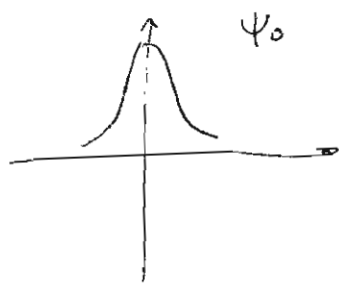
$$H\psi_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n$$

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

$$\psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\sqrt{\pi\hbar}}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} q\right) e^{-\frac{m\omega q^2}{2\hbar}},$$

Beweis. $H|_{\text{Schwartzschen Funktionen}}$ ist symmetrisch, hat dort ein vollständiges System von Eigenvektoren \Rightarrow Bild $(H \pm iI)$ sind dicht in \mathcal{H} , also H wesentlich selbstadjungiert. Es bleibt zu zeigen, daß dieser Definitionsbereich des selbstadjungierten Abschlusses ist $W^{2,2}(\mathbb{R}) \cap \mathcal{F}(W^{2,2}(\mathbb{R}))$. \square

Bilder



u.s.w. (ψ_n besitzt n Nullstellen)

merke den wichtigen Unterschied zwischen der klassischen und Quantenmechanik: in der klassischen

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} \Rightarrow |q| < \sqrt{\frac{2E}{m\omega}}$$

In der Quantenmechanik hat man eine positive Wahrscheinlichkeit, das Teilchen auch außerhalb von diesem Gebiet vorzufinden. Z.B. im Grundzustand mit $E = \frac{\hbar\omega}{2}$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im klassisch verbotenen Gebiet zu finden gleich

$$\int_{|q| > \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} |\psi_0(q)|^2 dq = \int_{|q| > \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} q^2} dq \cdot \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}$$

$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} 2 \int_1^{\infty} e^{-z^2/2} dz \quad q = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} z$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_1^{\infty} e^{-x^2/2} dx \approx 0,157 \quad \text{- ziemlich groß.}$$

Jeder Vektor $\varphi \in \mathcal{H}$ ist in der Form

$$\varphi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c_n}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \psi_0 = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n, \quad \sum_n |c_n|^2 < \infty$$

darstellbar, somit kann jedem $\varphi \in \mathcal{H}$ eine Folge

$(c_n)_{n=0}^{\infty} \in \ell_2^{\mathbb{C}}$ zugeordnet werden. Hierbei

$$c_n = (\varphi, \psi_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(q) \psi_n(q) dq \quad (\psi_n \text{ reellwertig}) \quad (6.9)$$

Wenn $\varphi_1 \leftrightarrow (a_n)_{n \geq 0}$, $\varphi_2 \leftrightarrow (b_n)_{n \geq 0}$, dann

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1(q) \overline{\varphi_2(q)} dq = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} c_m \overline{b_n} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(q) \psi_n(q) dq = \sum_{m=0}^{\infty} c_m \overline{b_m}$$

Also bekommen wir einen Isomorphismus $\mathcal{H} \leftrightarrow \ell_2$.

Wirkung der Operatoren a, a^* :

$$a^* \psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n a^* \psi_n = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1} c_n \psi_{n+1} = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n} c_{n-1} \psi_n, \quad \psi \in D(a^*)$$

$$a \psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n a \psi_n = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n} c_n \psi_{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1} c_{n+1} \psi_n, \quad \psi \in D(a),$$

d.h.

$$a \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad a^* \leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Für diese Matrizen kann man sofort die Relation

$[a, a^*] = I$ feststellen:

$$\begin{aligned} [a, a^*] &= a a^* - a^* a = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 3 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 4 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Der Hamiltonoperator ist in dieser Darstellung diagonal:

$$H = \hbar \omega \left(a^* a + \frac{I}{2} \right) = \hbar \omega \operatorname{diag} \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \right)$$

Also ist das die Eigendarstellung von H .

Operatoren P, Q :

$$\begin{aligned}
 a\psi &\leftrightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1} c_{n+1} f_n(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1} c_{n+1} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) c_{n+1} \frac{z^n}{\sqrt{(n+1)!}} \\
 &= \frac{d}{dz} \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1} \frac{z^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}} = \frac{df}{dz}
 \end{aligned}$$

$$a^*\psi \leftrightarrow \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n} c_{n-1} f_n(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n} c_{n-1} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} = \sum_{n=1}^{\infty} c_{n-1} \frac{z^n}{\sqrt{(n-1)!}} = z f(z)$$

Also

$$a \leftrightarrow \frac{d}{dz}, \quad a^* \leftrightarrow z$$

und

$$Q \leftrightarrow \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\frac{d}{dz} + z \right), \quad P \leftrightarrow \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \left(\frac{d}{dz} - z \right)$$

$$H \leftrightarrow \hbar\omega \left(z \frac{d}{dz} + \frac{1}{2} \right)$$