Quantenmechanischer Harmonischer Oszillator

0.1 Klassische Herleitung

Hooksches Gesetz:

$$F = -Dx \tag{1}$$

Kombiniert mit dem Newtonschen Axiom:

$$ma = -Dx \tag{2}$$

$$m\ddot{x} = -Dx \tag{3}$$

$$\Leftrightarrow \ddot{x} + \underbrace{\frac{D}{m}}_{\omega^2} x = 0 \tag{4}$$

$$\Rightarrow D = m\omega^2 \tag{5}$$

Die Hamiltonfunktion für dieses System ist die Summe aus kinetischer und potentieller Energie:

$$H = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}Dx^2 \tag{6}$$

Mit D aus (5) folgt die Hamilton-Funktion für den Harmonischen Oszillator:

$$\boxed{H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2} \tag{7}$$

Die Standardmethode der Analysis zur Lösung der Differentialgleichung unter der Nebenbedinuung, dass $\psi(x)$ quadratintegrabel ist, führt auf Hermite-Polynome. Wir wollen hier jedoch eine algebraische Methode benutzen.

0.2 Algebraische Methode

Als erstes definieren wir den nicht hermiteschen Operator a:

$$a = \frac{\omega m x + ip}{\sqrt{2\omega m\hbar}} \tag{8}$$

und den dazu komplexkonjgiergten Operator

$$a^\dagger = \frac{\omega m x - ip}{\sqrt{2\omega m\hbar}} \tag{9}$$

Durch die Addition von (8) und (9) erhalten wir den Ortsoperator:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}}(a + a^\dagger) \tag{10}$$

Und durch Subtraktion von (8) minus (9) erhalten wir den Impulsoperator:

$$p = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}(a - a^\dagger) \tag{11}$$

Aus dem Kommutator $[x, p] = i\hbar$ erhalten wir eine wichtige Beziehung:

$$\boxed{[a, a^\dagger] = 1} \tag{12}$$

Die von uns erhaltenen Orts- und Impuls-Gleichungen (10) und (11) eingesetzt in (7):

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m}\frac{\hbar\omega m}{2}(a-a^\dagger)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar}{2\omega m}(a+a^\dagger)^2 && (13)\\
&= -\frac{\hbar\omega}{4}(a-a^\dagger)^2 + \omega\frac{\hbar}{4}(a+a^\dagger)^2 && (14)\\
&= \frac{\hbar\omega}{4}\left[-(a-a^\dagger)^2 + (a+a^\dagger)^2\right] && (15)\\
&= \frac{\hbar\omega}{4}\left[\cancel{-a^2 - (a^\dagger)^2} + aa^\dagger + a^\dagger a + \cancel{a^2 + (a^\dagger)^2} + aa^\dagger + a^\dagger a\right] && (16)\\
&= \frac{\hbar\omega}{4}\left[aa^\dagger + a^\dagger a + aa^\dagger + a^\dagger a\right] && (17)\\
&= \frac{\hbar\omega}{2}\left[aa^\dagger + a^\dagger a\right] && (18)\\
& && (19)
\end{aligned}$$

Mit der Beziehung (12) $aa^\dagger = 1 + a^\dagger a$ ergibt sich der Hamilton Operator als Ausdruck des Absolutquadtrats vom Oparator a:

$$\boxed{H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)} \tag{20}$$

0.3 Spektrum der Energieeigenwerte

Als nächstes wollen wir das Enegriespektrum des Harmonischen Oszillators bestimmen. Es reicht dazu die Eigenwerte des 'Zähloperators' zunächst zu betrachten:

$$N = a^\dagger a \tag{21}$$

Mit der Eigenwertgleichung:

$$N|n\rangle = n|n\rangle \tag{22}$$

Wendet man den Hamiltonoperator auf die Energieeigenzustände an so ergibt sich:

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{23}$$

$$\hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{24}$$

Damit erhalten wir für die Energieeigenwerte:

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)} \tag{25}$$

Wir werden später zeigen, dass n eine positive ganze Zahl ist.

Nun wollen wir die physikalische Bedeutung des eigenführten Operators a untersuchen. Dazu benötigen wir zwei Relationen:

$$\begin{aligned}
[a, H] &= [a, \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})] && (26)\\
&= \hbar\omega[a, a^\dagger a] && (27)\\
&= -\hbar\omega[a^\dagger a, a] \qquad \text{mit } [AB, C] = A[B, C] + [A, C]B && (28)\\
&= -\hbar\omega(\underbrace{a^\dagger[a, a]}_{=0} + \underbrace{[a^\dagger, a]}_{=-1}a) && (29)\\
&= \hbar\omega a && (30)
\end{aligned}$$

Analog erhält man:

$$[a^\dagger, H] = -\hbar\omega a^\dagger \tag{31}$$

Nun betrachten wir folgende Eigenwertgleichungen:

$$\overbrace{\underline{H}(a}^{(30)}|n\rangle) = (aH - \hbar\omega a)|n\rangle = \underline{(E_n - \hbar\omega)}(a|n\rangle) \tag{32}$$

$$\overbrace{\underline{H}(a^\dagger}^{(31)}|n\rangle) = (a^\dagger H + \hbar\omega a^\dagger)|n\rangle = \underline{(E_n + \hbar\omega)}(a^\dagger|n\rangle) \tag{33}$$

Aus den Gleichungen (32) und (33) sieht man dass $(a|n\rangle)$ und $(a^\dagger|n\rangle)$ Eigenzustände von H mit den Eigenwerten $(E_n - \hbar\omega)$ und $(E_n + \hbar\omega)$ sind. Die entsprechende Wirkung der Operatoren a und $a^\dagger$ auf die Energieeigenzustände $|n\rangle$ erzeugt ein neuen Energiezustand der sich um $\hbar\omega$ verringert bzw. erhöht. Deswegen werden die Operatoren a und $a^\dagger$ als vernichtungs(absteige) bzw. erzeugungs(aufsteige) Operatoren bezeichnet.
Als nächstes wollen wir feststellen was passiert wenn wir die Operatoren a und $a^\dagger$ auf die Energieeigenzustände anwenden. Dazu benötigen wir zwei weitere Kommutator-Relationen:

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] \tag{34}$$

$$= a^\dagger \underbrace{[a, a]}_{=0} + \underbrace{[a^\dagger, a]}_{-1} a \tag{35}$$

$$= -a \tag{36}$$

und analog für $a^\dagger$ folgt:

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger \tag{37}$$

Nun ähnlich zu den Gleichungen (32) und (33) für den Hamiltonoperator betrachten wir Eigenwertgleichungen für den Operator N:

$$\overbrace{\underline{N}(a}^{(36)}|n\rangle) = a(N-1)|n\rangle = \underline{(n-1)}(a|n\rangle) \tag{38}$$

$$\overbrace{\underline{N}(a^\dagger}^{(37)}|n\rangle) = a^\dagger(N+1)|n\rangle = \underline{(n+1)}(a^\dagger|n\rangle) \tag{39}$$

Aus den beiden Gleichungen (38) und (39) folgt $(a|n\rangle)$ und $(a^\dagger|n\rangle)$ Eigenzustände von N mit den Eigenwerten $(n-1)$ und $(n+1)$ sind. Das bedeutet, dass $(a|n\rangle)$ und $(a^\dagger|n\rangle)$ angewandt auf die Zustände $|n\rangle$ erniedrigen bzw. erhöhen jeweils um 1. D.h. dass a angewand auf $|n\rangle$ erzeugt einen neuen Zustand mit $|n-1\rangle$ und $a^\dagger$ angewand auf $|n\rangle$ erzeugt einen neuen Zustand mit $|n+1\rangle$. Damit erhalten wir folgende Beziehung:

$$a|n\rangle = c_n|n-1\rangle \tag{40}$$

Wobei c_n eine die noch zu bestimmende Konstante ist. Um c_n zu bestimmen nutzen wir die Normierungsbedinung für den Zustand $(a|n\rangle)$ aus:

$$(\langle n|a^\dagger) \cdot (a|n\rangle) = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = |c_n|^2\langle n-1|n-1\rangle = |c_n|^2 \tag{41}$$

Desweiteren gilt:

$$(\langle n|a^\dagger) \cdot (a|n\rangle) = \langle n|\underbrace{a^\dagger a}_{N}|n\rangle = n \tag{42}$$

Aus (41) und (42) folgt:

$$c_n = \sqrt{n} \tag{43}$$

Eingesetzt in die Gleichung (40):

$$\boxed{a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle} \tag{44}$$

Eine analoge Rechnung für den Aufsteige-Operator ergibt:

$$\boxed{a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle} \tag{45}$$

Wendet man den Absteige-Operator auf den Zustand $|n\rangle$ sukzessive an, wird der Zustand immer um 1 kleiner bis zum Grundzustand mit $n = 0$. Weitere Anwendung des Operators auf den Null-Zustand $a|0\rangle$ ergibt Null. Wendet man nun startend vom Grundzustand aus den Aufsteige-Operator an so wird n immer um eine ganze Zahl erhöht. Daraus folgt dass n eine positive ganze Zahl sein muss. Somit ist das Spektrum für die Energieeigenwerte gegeben mit:

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad n \in \mathbb{N}_0} \tag{46}$$

Da n eine positive ganze Zahl ist, ist das Energiespektrum des harmonischen Oszillators quantisiert. Im Gegensatz zum Klassischen Fall gibt es eine nicht verschwindende Nullpunktenergie (Grundzustandsenergie) für $n = 0$:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \tag{47}$$

Die Nullpunktenergie darf nach dem Quantenmechanischen Prinzip auch nicht Null werden, da es die Unschärferelation verletzen würde.