Eigenzustände des harmonischen Ostillators

Wiederholung:
Beschreibung des Verhaltens eines Systems bei kleinen Auslenkungen aus der Gleichgewichtslage, z.B. Molekülschwingungen

$$V(x) = \underbrace{V(x_0)}_{\text{Gleichgewichtslage}} + \underbrace{\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{x=x_0}}_{=0 \ (\text{Minimum})} (x-x_0) + \frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right|_{x-x_0} (x-x_0)^2 + \underbrace{\dots}_{\text{klein}}$$

$$\Rightarrow V(x) = V(x_0) + \frac{1}{2} k (x-x_0)^2$$

$$k = \left.\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right|_{x=x_0} = \underbrace{m}_{\text{Masse}} \cdot \underbrace{\omega^2}_{\text{Schwingungsfrequenz}}$$

Hamiltonoperator
(wähle $x_0 = 0$, $V(x_0) = 0$):

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Lösung der Schrödingergleichung $H\psi = E\psi$

Vernichtungsoperator:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}\,\hat{p}$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\frac{d}{dx}$$

Erzeugungsoperator:

$$\hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}\,\hat{p}$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\frac{d}{dx}$$

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

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad \Rightarrow$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^+\right)^n \left(\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\; e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar^2}x^2}\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n}}\,\hat{a}^+\,\psi_{n-1}(x)$$

Vereinfachung:
massen- und frequenzgewichtete Koordinaten
$\rightarrow$ Behandlung unabhängig von spezifischen Systemparametern

$$q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,(x - x_0) \Rightarrow \frac{d}{dq} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\frac{d}{dx}$$

$$\Rightarrow \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q + \frac{d}{dq}\right), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q - \frac{d}{dq}\right)$$

$$\psi_n(q) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,(\hat{a}^+)^n \left(\sqrt[4]{\frac{1}{\pi}}\, e^{-\frac{1}{2}q^2}\right)$$

$$= \frac{1}{\pi^{1/4}}\,\frac{1}{\sqrt{n!}}\,\frac{1}{\sqrt{2^n}}\left(q - \frac{d}{dq}\right)^n e^{-\frac{1}{2}q^2}$$

Hermite-Polynome:

$$H_n(q) = e^{q^2/2}\left(q - \frac{d}{dq}\right)^n e^{-q^2/2}$$

ist ein Polynom n-ter Ordnung

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

Praktikumsaufgabe: explizite Berechnung

Entwicklung einer Rekursionsformel zur Berechnung der Hermite-Polynome

$$H_n(q) = e^{q^2/2} \left(q - \frac{d}{dq}\right)^n e^{-q^2/2}$$

$$= e^{q^2/2} \left(q - \frac{d}{dq}\right)^{n-1} \left(q - \frac{d}{dq}\right) e^{-q^2/2}$$

$$= e^{q^2/2} \left(q - \frac{d}{dq}\right)^{n-1} \left(q\, e^{-q^2/2} - \left(-\frac{2q}{2}\right) e^{-q^2/2}\right)$$

$$= e^{q^2/2} \left(q - \frac{d}{dq}\right)^{n-1} \cdot 2q \cdot e^{-q^2/2}$$

$$= e^{q^2/2} \left(\left(q - \frac{d}{dq}\right)^{n-1} \cdot 2q - 2q \left(q - \frac{d}{dq}\right)^{n-1} + 2q \left(q - \frac{d}{dq}\right)^{n-1} \right) e^{-q^2/2}$$

$$= e^{q^2/2} \left[\left(q - \frac{d}{dq}\right)^{n-1}, 2q \right] e^{-q^2/2}$$

$$+ 2q\, H_{n-1}(q)$$

Berechnung des Kommutators:

$$
\begin{aligned}
[\hat{A}^n, \hat{B}] &= \hat{A}^n \hat{B} - \hat{B}\hat{A}^n \\
&= \hat{A}^n \hat{B} - \hat{A}^{n-1}\hat{B}\hat{A} + \hat{A}^{n-1}\hat{B}\hat{A} \\
&\quad - \hat{A}^{n-2}\hat{B}\hat{A}^2 + \hat{A}^{n-2}\hat{B}\hat{A}^2 - \ldots - \hat{B}\hat{A}^n \\
&= \hat{A}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}] + \hat{A}^{n-2}[\hat{A}, \hat{B}]\hat{A} \\
&\quad + \hat{A}^{n-3}[\hat{A}, \hat{B}]\hat{A}^2 + \ldots + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A}^{n-1} \\
&= \sum_{i=0}^{n-1} \hat{A}^{n-1-i}[\hat{A}, \hat{B}]\hat{A}^i
\end{aligned}
$$

$$\left[\left(q - \frac{d}{dq}\right)^{n-1}, 2q\right] =$$

$$\sum_{i=0}^{n-2}\left(q - \frac{d}{dq}\right)^{n-2-i}\left[q - \frac{d}{dq}, 2q\right]\left(q - \frac{d}{dq}\right)^{i}$$

mit $\left[q - \frac{d}{dq}, 2q\right] = -2$ folgt:

$$
\begin{aligned}
\left[\left(q - \frac{d}{dq}\right)^{n-1}, 2q\right] &= -2 \cdot \sum_{i=0}^{n-2}\left(q - \frac{d}{dq}\right)^{n-2} \\
&= -2\,(n-1)\left(q - \frac{d}{dq}\right)^{n-2}
\end{aligned}
$$

Einsetzen:

$$H_n(q) = e^{q^2/2}\left(-2\,(n-1)\,\left(q-\frac{d}{dq}\right)^{n-2}\right)e^{-q^2/2}$$
$$+\,2q\;H_{n-1}(q)$$
$$= 2q\;H_{n-1}(q) - 2\,(n-1)\;H_{n-2}(q)$$

Rekursionsformel für die Hermite-Polynome $\rightarrow$ ermöglicht einfache numerische Berechnung

Durchführung der ersten Rekursionen:

$H_0(q) = 1$ (Definition)

$H_1(q) = 2q \cdot H_0(q) = 2q$

$H_2(q) = 2q \cdot H_1(q) - 2 \cdot 1 \cdot H_0(q)$
$= 4q^2 - 2$

$H_3(q) = 2q \cdot H_2(q) - 2 \cdot 2 \cdot H_1(q)$
$= 2q \cdot (4q^2 - 2) - 4 \cdot 2q = 8q^3 - 12q$

Versuch: numerische Implementierung für jeweils gegebenes q