

2.9 Der harmonische Oszillator

2.9.1 Einführung

Wir wenden uns nun einem realistischeren Einschluss-Potential zu – dem parabolischen Potential des harmonischen Oszillators, das ein häufig anzutreffender Fall ist. Darüber hinaus kann es als Grenzfall einer Taylor-Entwicklung allgemeiner Potentiale mit einem Minimum (wir wählen $x = 0$) betrachtet werden:

$$V(x) = V(0) + \frac{dV}{dx}\Big|_0 \cdot x + \frac{1}{2} \frac{d^2V}{dx^2}\Big|_0 \cdot x^2 + \dots$$

Ist $|V'''(0)|x \ll |V''(0)|$, so kann diese harmonische Näherung angewendet werden. Dies ist oft zutreffend bei hinreichend kleiner Auslenkung aus der Gleichgewichtslage, die durch

$$\frac{dV}{dx}\Big|_0 = -F(0) = 0,$$

beschrieben wird. Im Folgenden werden wir, ohne Beschränkung der Allgemeinheit, von $V(0) = 0$ ausgehen, da sich die Energieskala beliebig verschieben lässt.

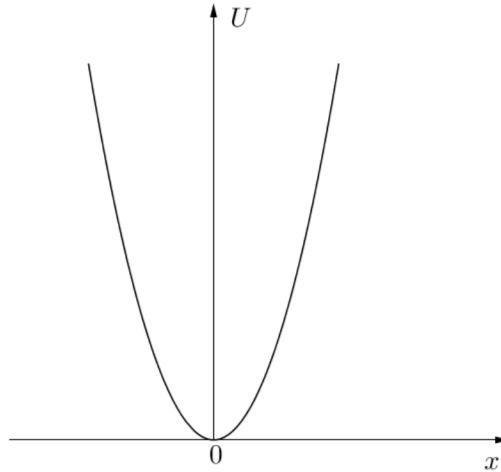


Abbildung 2.32: Parabolisches Potential $U(x)$.

Beispiele für harmonische Oszillationen sind:

- kleine Schwingungen in Festkörpern (Phonen)
- Molekülschwingungen
- Confinement-Potential in Elementarteilchen (Quarks).

Wir werden das allgemeine harmonische Oszillatorenpotential der Form

$$V(x) = \frac{\alpha}{2}x^2,$$

jetzt untersuchen. Erinnern wir uns zunächst an den klassischen Oszillatoren: er wird durch die klassische Hamiltonfunktion

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2, \quad (2.76)$$

beschrieben, wobei ω die Eigenfrequenz ist, mit:

$$\omega = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}.$$

Die Lösung der Newtonschen Gleichung mit der rücktreibenden Kraft $F = -\frac{d}{dx}V(x) = -m\omega^2x$ sind Schwingungen um die Ruhelage mit der Frequenz ω .

2.9.2 Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung. Sommerfeld–Polynom-Methode

In der Quantenmechanik erwarten wir, dass der Hamilton-Operator \hat{H} eine analoge Form wie (2.76) besitzt:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2, \quad (2.77)$$

mit dem Unterschied, dass sowohl Ort als auch Impuls jetzt als Operatoren zu verstehen sind. Die stationäre Schrödinger-Gleichung, also das Eigenwertproblem, ist wie gewohnt:

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(x) &= E\psi(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{m}{2}\omega^2x^2\psi &= E\psi. \end{aligned} \quad (2.78)$$

Hier haben wir stillschweigend \hat{x} durch x ersetzt, da dies der Schrödinger-Gleichung entspricht, die wir vorher betrachtet haben. Wir werden später sehen, dass dies ein Spezialfall der quantenmechanischen Beschreibung (die Ortsdarstellung) ist.

Diese Gleichung gilt es nun zu lösen. Wir tun dies in mehreren Schritten¹⁹.

1. Zunächst führen wir wieder **dimensionslose Variable** ein. Als Energieeinheit wählen wir:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2},$$

und die dimensionslose Energie (in Einheiten von E_0) nennen wir ϵ :

$$\epsilon = \frac{E}{E_0}.$$

Wir erhalten, nach Multiplikation mit $2/\hbar\omega$:

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

was die Definition der folgenden Längeneinheit nahelegt:

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad (2.79)$$

und nennen die dimensionslose Länge (in Einheiten von x_0) u :

$$u = \frac{x}{x_0}.$$

Wir untersuchen im Folgenden die Wellenfunktion in Abhängigkeit von u , wobei wir die Bezeichnung $\psi(u)$ beibehalten. Es ergibt sich:

¹⁹Das Vorgehen ist typisch für die Lösung stationärer quantenmechanischer Probleme.

Die Webersche Differentialgleichung eines Teilchens im harmonischen Oszillator:

$$-\frac{d^2\psi}{du^2} + u^2\psi = \epsilon\psi \quad (2.80)$$

Wir erwarten – nach den vorigen Abschnitten – eine gebundene Bewegung. Die Randbedingungen ergeben sich aus der Forderung, dass die Wahrscheinlichkeit für ein Eindringen des Teilchens in die klassisch verbotenen Bereiche bei $x \rightarrow \pm\infty$ verschwindet, da dort das Potential unendlich groß ist. Es soll also gelten:

$$\lim_{u \rightarrow \pm\infty} \psi(u) = 0. \quad (2.81)$$

Ebenso fordern wir wieder die Normierbarkeit. Da dies wieder eine Differentialgleichung zweiter Ordnung ist, gibt es wieder zwei unabhängige Lösungen.

2. Wir untersuchen nun das **asymptotische Verhalten** für $u \rightarrow \pm\infty$. In diesem Fall wird unser ϵ vernachlässigbar klein gegen den Rest der Gleichung sein, und wir erhalten die einfachere Gleichung:

$$\psi''_\infty - u^2\psi_\infty = 0$$

Diese Gleichung lösen wir mit dem Ansatz:

$$\psi_\infty \propto e^{\pm\frac{1}{2}u^2}.$$

Da ψ_∞ jedoch endlich sein muss, ist nur der Term mit $e^{-\frac{1}{2}u^2}$ möglich.

3. Den **Ansatz für die Gesamtlösung** führen wir nun wie folgt ein:

$$\psi(u) = e^{-\frac{1}{2}u^2} H(u),$$

wobei $H(u)$ eine zu bestimmende Funktion ist. Bevor wir diesen Ansatz in die Schrödinger-Gleichung einsetzen, berechnen wir die erforderlichen Ableitungen:

$$\begin{aligned} \psi'(u) &= -u\psi + e^{-\frac{1}{2}u^2} H'(u), \\ \psi''(u) &= u^2\psi - \psi - ue^{-\frac{1}{2}u^2} H'(u) - ue^{-\frac{1}{2}u^2} H'(u) + e^{-\frac{1}{2}u^2} H''(u). \end{aligned}$$

Setzen wir diese nun ein und kürzen gleich mit $e^{-1/2u^2}$, so erhalten wir folgende nicht durch elementare Funktionen lösbarer Gleichung:

$$H''(u) - 2uH'(u) + (\epsilon - 1)H(u) = 0. \quad (2.82)$$

4. Ein möglicher Ansatz für die Funktion $H(u)$ ist nun eine Potenzreihe:

$$H(u) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n u^n, \quad (2.83)$$

und es gilt nun, die Koeffizienten zu bestimmen. Wir berechnen dazu wieder zunächst die Ableitungen und führen bei der zweiten Ableitung eine Indexverschiebung durch (Ziel ist

es, identische Summen in allen Termen zu erhalten):

$$\begin{aligned} H'(u) &= \sum_{n=0}^{\infty} n a_n u^{n-1}, \\ 2uH'(u) &= \sum_{n=0}^{\infty} 2n a_n u^n, \\ H''(u) &= \sum_{m=0}^{\infty} m(m-1) a_m u^{m-2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2) a_{n+2} u^n, \end{aligned}$$

wobei die Summanden $m = 0$ und $m = 1$ keinen Beitrag liefern, so dass im letzten Schritt eine Indexverschiebung, $m \rightarrow n+2$, vorgenommen wurde. Setzen wir dies in die Differentialgleichung ein, so erhalten wir:

$$\sum_{n=0}^{\infty} u^n [(n+1)(n+2)a_{n+2} - 2na_n + (\epsilon - 1)a_n] = 0.$$

Dies muss nun für alle n separat erfüllt sein, da die Beiträge unterschiedlicher Potenzen voneinander unabhängig sind. Es muss also der Ausdruck in der eckigen Klammer für alle n separat verschwinden. Umgeformt ergibt uns diese Bedingung eine Rekurrenzformel:

$$a_{n+2} = a_n \frac{2n+1-\epsilon}{(n+2)(n+1)}. \quad (2.84)$$

Wir haben also 2 freie Koeffizienten. Die Vorgabe von a_0 bestimmt alle geraden n . Diese Funktionen nennen wir $H_+(u)$. Die Vorgabe von a_1 bestimmt alle ungeraden n . Diese Funktionen nennen wir $H_-(u)$.

5. Wir testen nun, ob das oben besprochene asymptotische Verhalten durch den Ansatz (2.83) gewährleistet wird. Wir besprechen dies für $H_+(u)$ (die Rechnung erfolgt analog für die ungeraden Funktionen).

$$H_+(u) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n} u^{2n}.$$

Für große n gilt

$$\frac{a_{2n+2}}{a_{2n}} \rightarrow \frac{1}{n} \quad (2.85)$$

Ebenso gilt für große n :

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_{2n} u^{2n} = a_{2n} u^{2n} \left[1 + \frac{u^2}{n} + \frac{u^4}{n(n+1)} + \dots \right]$$

Dies ist aber genau²⁰ die Taylorentwicklung von e^{u^2} . Nun würde $\psi_+(u) \propto e^{u^2} \cdot e^{-\frac{u^2}{2}}$ aber für große $|u|$ divergieren. Analog würden auch die ungeraden Funktionen divergieren. Damit ist klar, dass der Ansatz (2.83) nicht korrekt ist.

²⁰Streng genommen, ergibt sich die e-Funktion für $n = 2$, für die Relation (2.85) noch nicht erfüllt ist. Der Fehler der Terme niedriger Ordnung zur Summe ist aber vernachlässigbar.

6. Ein möglicher Ausweg ist nun die Forderung, dass die Reihe bei einem endlichen Index abbrechen muss:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \rightarrow \sum_{n=0}^k$$

Dies führt dann auf Polynome, deren asymptotisches Verhalten immer schwächer ist als das der e-Funktion. Die Polynome haben dann offensichtlich die Eigenschaft, dass ein $a_n \neq 0$ existiert mit $a_l = 0$ für alle $l > n$. Betrachten wir nun die Rekurrenzformel (2.84) und setzen a_n als eben diesen letzten Koeffizienten ungleich 0. Dann gilt $a_{n+2} = 0$:

$$\frac{2n+1-\epsilon}{(n+2)(n+1)} a_n = 0$$

$$\epsilon_n = 2n+1$$

Im letzten Schritt haben wir die dimensionslose Energie ϵ mit einem Index versehen, da es ja eine Serie von Lösungen gibt, je nachdem, bei welcher Ordnung die Reihe abgebrochen wird. Damit wird klar, dass wir Lösungen der Schrödinger-Gleichung gefunden haben, die nur zu diskreten Energien korrespondieren.

Setzen wir nun wieder die Definition von ϵ ein, so erhalten wir die diskreten Energie-Eigenwerte (Bindungszustände):

$$\frac{E_n}{E_0} = 2n+1$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (2.86)$$

Die Energiequantisierung ist analog zum Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden. Der Unterschied besteht darin, dass hier ein äquidistantes Energiespektrum vorliegt²¹:

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega.$$

Die Grundzustandsenergie, $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, ist wiederum endlich, was wieder mit der Unschärferelation zusammenhängt.

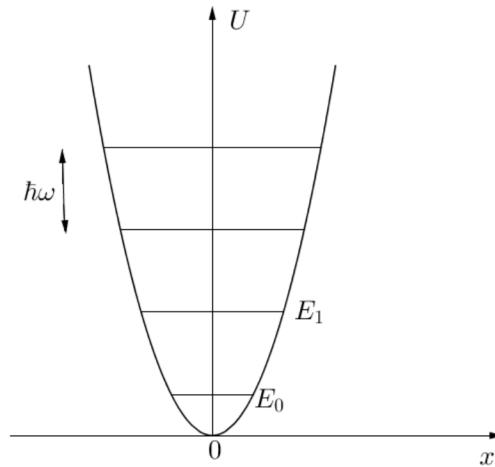


Abbildung 2.33: Äquidistante Energieniveaus im harmonischen Oszillatorenpotential.

²¹Der Grund ist, dass hier das Potential wesentlich langsamer anwächst.

Wir schlussfolgern, dass die Lösung durch einen Potenzreihen-Ansatz und den Abbruch der Reihe erfolgreich war²².

Kommen wir nun zu den Eigenfunktionen $\psi_n(u)$. Es gilt mit unserem Ansatz:

$$\psi_n(u) = C_n e^{-\frac{u^2}{2}} H_n(u). \quad (2.87)$$

Hierbei sind für gerade n die Polynome:

$$H_{+n}(u) = a_0^{(n)} + a_2^{(n)}u^2 + \dots + a_n^{(n)}u^n,$$

und für n ungerade:

$$H_{-n}(u) = a_1^{(n)}u + a_3^{(n)}u^3 + \dots + a_n^{(n)}u^n.$$

Wir wählen nun willkürlich (dies ist die Standard-Konvention):

$$a_n^{(n)} = 2^n.$$

Um die Koeffizienten niedrigerer Ordnung, $m < n$, aus $a_n^{(n)}$ zu berechnen, schreiben wir die Rekurrenzformel (2.84) noch einmal um, wobei wir den Index der Koeffizienten jetzt mit m bezeichnen, um dies von der Ordnung n des Polynoms zu unterscheiden:

$$a_{m+2}^{(n)} = a_m^{(n)} \frac{2m+1-\epsilon_n}{(m+2)(m+1)}, \quad m+2 \leq n. \quad (2.88)$$

Um hiermit etwas vertraut zu werden, rechnen wir hier die ersten Polynome aus:

$$\begin{aligned} H_0(u) &= 2^0 \cdot u^0 = 1, \\ H_1(u) &= 2^1 \cdot u^1 = 2u, \\ H_2(u) &= a_0^{(2)} + a_2^{(2)}u^2. \end{aligned}$$

In der letzten Zeile müssen wir aus $\epsilon_2 = 2 \cdot 2 + 1 = 5$ und $a_2^{(2)} = 2^2$ den ersten Koeffizienten bestimmen. Aus Formel (2.88) ergibt sich mit $m = 0$ (!)

$$\begin{aligned} a_2^{(2)} &= 4 = a_0^{(2)} \frac{2 \cdot 0 + 1 - 5}{(0+2)(0+1)}, \\ a_0^{(2)} &= -2. \end{aligned}$$

Also ist das Polynom gegeben durch

$$H_2(u) = -2 + 4u^2.$$

Die folgenden Polynome geben wir ohne Rechnung an:

$$\begin{aligned} H_3(u) &= 8u^3 - 12u, \\ H_4(u) &= 16u^4 - 48u^2 + 12, \\ H_5(u) &= 32u^5 - 160u^3 + 120u. \end{aligned}$$

Aufgabe: Man berechne die Polynome $H_3(u)$, $H_4(u)$ und $H_5(u)$, unter Verwendung der Rekurrenzformel (2.88).

²²Dieses Konzept geht auf Arnold Sommerfeld zurück (Sommerfeldsche Polynom-Methode) und ist auch für andere quantenmechanische Probleme, wie etwa das Wasserstoff-Problem, erfolgreich.

2.9.3 Hermite-Polynome

Die oben gefundenen Polynome H nennt man auch Hermite-Polynome²³. Wir geben die wichtigsten Eigenschaften an.

a.) Die Polynome besitzen folgende Darstellung:

$$H_n(u) = (-1)^n e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2} = 2^n u^n + \dots \quad (2.89)$$

b.) Daraus folgt sofort

$$\frac{d^n}{du^n} H_n = 2^n n! \quad (2.90)$$

c.) Wir geben nun ohne Ableitung noch zwei weitere Eigenschaften von H_n an:

$$H'_n(u) = 2n H_{n-1}(u), \quad (2.91)$$

d.) sowie

$$u H_n(u) = n H_{n-1}(u) + \frac{1}{2} H_{n+1}(u) \quad (2.92)$$

Diese Eigenschaften werden wir im Folgenden noch benutzen.

2.9.4 Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators

Wir wollen nun die Eigenfunktionen $\psi_n(u)$ skizzieren. Hierfür halten wir noch fest, dass $H_n(u)$ genau n reelle Nullstellen besitzt. Mit der Gauss-Funktion der Gesamtlösung, welche keine Nullstellen besitzt, haben wir also wieder dieselbe Anzahl an Knotenpunkten wie beim Teilchen im Kastenpotential. Berechnen wir nun die Eigenfunktionen. Der Grundzustand ergibt sich, mit $H_0(u) = 1$, zu:

$$\psi_0(u) = C_0 e^{-\frac{u^2}{2}},$$

und die zugehörige Grundzustandsenergie beträgt $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$. Zum ersten angeregten Zustand gehört das Hermite-Polynom $H_1(u) = 2u$. Also ist

$$\psi_1(u) = C_1 \cdot 2u \cdot e^{-\frac{u^2}{2}},$$

die Wellenfunktion für diesen Zustand mit der Energie $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$. Diese Wellenfunktion hat eine Nullstelle bei $u = 0$ und weist Extrempunkte bei $u_E = \pm 1$ auf. Nun betrachten wir noch $\psi_2(u)$:

$$\psi_2(u) = C_2 (4u^2 - 2) e^{-\frac{u^2}{2}},$$

welche zur Energie $E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ korrespondiert. Diese Funktion hat zwei Nullstellen, $u_E = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}$ und drei Extrema bei $u = 0$ sowie $u = \pm \sqrt{\frac{5}{2}}$. Diese Funktionen sind in Abbildung 2.34 dargestellt. Hier erkennt man bereits den Trend, dass mit wachsendem n die äußeren Maxima der Wellenfunktion immer weiter nach außen wandern. Wir werden etwas später (vgl. Abschnitt

²³eingeführt vom französischen Mathematiker Charles Hermite (1822-1901)

2.9.5) sehen, dass dieser Trend mit großen n zum klassischen Grenzfall führt, bei dem die Wahrscheinlichkeitsdichte nah an den klassischen Umkehrpunkten gepeakt ist.

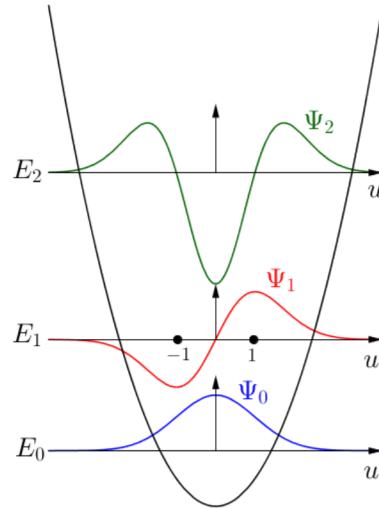


Abbildung 2.34: Die ersten drei Eigenzustände des eindimensionalen linearen harmonischen Oszillators.

Wir vergleichen nun noch den klassischen harmonischen Oszillator mit dem quantenmechanischen Oszillator. Im klassischen Fall ist die kleinste möglich Energie $E_{min} = 0$, und es sind beliebige kontinuierliche positive Energiewerte möglich. In der Quantenmechanik existiert dagegen ein endliches Minimum (der Grundzustand), $E_{min} = \frac{\hbar\omega}{2}$, und die möglichen Energie-Eigenwerte sind diskrete äquidistante Werte. In der Klassik kann ein Teilchen niemals in die Bereiche außerhalb des Potentials eindringen. In der Quantenmechanik stellen wir dagegen ein Eindringen von $\psi(x)$ in diese Bereiche fest. In diesen Bereichen gibt es dann einen exponentiellen Abfall der Wahrscheinlichkeitsamplitude mit wachsendem $|x|$ bzw. $|u|$.

Normierung der Wellenfunktionen: Um die vollständige Lösung anzugeben, benötigen wir noch die Werte der Konstanten C_n . Wie üblich berechnen wir diese über die Normierungsbedingung. Hierbei muss die Wahrscheinlichkeitsdichte, ρ_n , eines Zustandes n in $[-\infty, \infty]$ auf 1 normiert sein. Um dies zu berechnen, ersetzen wir wieder unser u durch x , indem wir uns an

$$u = \frac{x}{x_0}, \quad \text{mit } x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

erinnern. Aus Glg. (2.87) wird dann:

$$\psi_n(x) = C_n e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)$$

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx \\ &= C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) dx \end{aligned}$$

Wir substituieren nun wieder

$$\begin{aligned} u &= \frac{x}{x_0} \\ \frac{du}{dx} &= \frac{1}{x_0} \\ dx &= x_0 du \end{aligned}$$

und erhalten:

$$1 = C_n^2 x_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} H_n(u) H_n(u) du$$

Die Rückersetzung zuvor mussten wir durchführen, um bei der Substitution den Faktor x_0 nicht zu vergessen. Wir benutzen nun Glg. (2.89) und erhalten:

$$\begin{aligned} 1 &= (-1)^n x_0 C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} e^{u^2} H_n(u) \cdot \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2} du \\ &= (-1)^n x_0 C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n(u) \cdot \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2} du \end{aligned}$$

Im Folgenden führen wir eine n -fache partielle Integration durch. Hierbei wechselt bei jeder erneuten partiellen Integration das Vorzeichen vor dem entstehenden Integral. Wir erhalten also einen weiteren Faktor $(-1)^n$. Die partielle Integration wählen wir so, dass wir immer den Exponentialteil integrieren, damit bei jedem Schritt eine Ableitung wegfällt. Man erhält:

$$\begin{aligned} 1 &= \underbrace{(-1)^{2n}}_{=1} x_0 C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n H_n(u)}{du^n} \cdot e^{-u^2} du \\ 1 &= x_0 C_n^2 2^n \cdot n! \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du}_{\sqrt{\pi}} \\ &= x_0 C_n^2 2^n n! \sqrt{\pi}, \end{aligned}$$

wobei wir Eigenschaft (2.90) der Hermite-Polynome benutzt haben. Man erhält den Vorfaktor der n -ten Wellenfunktion also zu:

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi} n! 2^n}}. \quad (2.93)$$

Bei der mehrfachen partiellen Integration haben wir den ersten Term jeder partiellen Integration unter den Tisch fallen lassen. Dass dieser tatsächlich immer Null wird, zeigen wir jetzt am Beispiel des ersten Terms:

$$\left[\frac{d^{n-1}}{du^{n-1}} \left(e^{-u^2} \right) H_n(u) \right]_{-\infty}^{\infty} = \left[H_{n-1}(u) H_n(u) \frac{1}{e^{u^2} (-1)^n} \right]_{-\infty}^{\infty},$$

wobei wir wieder Glg. (2.89) benutzt haben. Der Abfall der Exponenten an den Grenzen sorgt dafür, dass dieser Term an beiden Rändern verschwindet.

Orthogonalität: Im Folgenden wollen wir einige Eigenschaften der Eigenfunktionen ψ_n besprechen. Zunächst ist zu sagen, dass die Eigenfunktionen bezüglich des Skalarproduktes

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \psi_m(x),$$

ein Orthonormalsystem bilden. Es gilt also für n und m :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{n,m}. \quad (2.94)$$

Diese Eigenschaft ist eine Konsequenz der Orthogonalität von Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten eines hermiteschen Operators, die wir in Abschnitt 3.3 beweisen werden (Satz 5). Das Verschwinden des Integrals für $n \neq m$ können wir aber auch durch direkte Rechnung prüfen. Dazu verwendet man wieder mehrfache partielle Integration, völlig analog zur Normierung²⁴. Darüber hinaus bildet die Gesamtheit der $\{\psi_n(x)\}$ ein vollständiges Funktionensystem. Das heißt, dass man jede Funktion φ als Linearkombination der Oszillator-Eigenfunktionen schreiben kann:

$$\varphi(x) = \sum_{l=0}^{\infty} D_l \psi_l(x), \quad D_l \in \mathcal{C}.$$

Wir fassen unsere Ergebnisse zusammen:

Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} x_0}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n \left(\frac{x}{x_0}\right) \quad (2.95)$$

Hierbei ist x_0 die Ausdehnung der Grundzustandsfunktion:

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (2.96)$$

Die Energien sind für $n \in \mathbb{N}$ äquidistant gemäß

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (2.97)$$

verteilt. Die Ortswahrscheinlichkeits-Dichte ist gegeben durch:

$$\rho_n(x) = |\psi_n(x)|^2 = \frac{e^{-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}}{2^n n! \sqrt{\pi} x_0} H_n^2 \left(\frac{x}{x_0}\right), \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho_n(x) = 1 \quad (2.98)$$

und ist für alle n auf 1 normiert.

²⁴Dabei wendet man zweckmäßigerweise die Ableitung zunächst für die Funktion Ψ_n an, mit $n > m$, so dass die n -fache partielle Integration auf eine n -fache Differentiation von H_m führt, was Null ergibt.

2.9.5 Vergleich mit der klassischen Mechanik. Unschärfe

Vergleichen wir nun die berechnete quantenmechanische Ortswahrscheinlichkeit mit der klassischen Ortswahrscheinlichkeit. Es gilt für die Bewegung eines klassischen Teilchens im harmonischen Oszillatorenpotential:

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= F = -kx \\ \ddot{x} + \omega_0^2 x &= 0 \end{aligned}$$

mit $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$. Die Verweildauer dt im Intervall dx am Ort x hängt zusammen mit der klassischen Wahrscheinlichkeitsdichte, $\rho_{cl}(x)$, und der infinitesimalen Wahrscheinlichkeit durch:

$$dP_{cl} = \rho_{cl}(x)dx = \frac{dt}{\frac{T}{2}} = \frac{\omega_0}{\pi} \frac{dx}{\frac{dx}{dt}} = \frac{\omega_0}{\pi v} dx$$

Betrachten wir nun die Lösung mit $x(0) = 0$ und $v(0) = v_0 = \omega_0 x_0$:

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0 \sin \omega_0 t \\ v(t) &= \omega_0 x_0 \cos \omega_0 t \end{aligned}$$

Hierbei sind $\pm x_0$ die klassischen Umkehrpunkte bei den Energien E_n :

$$\begin{aligned} \frac{m}{2} \omega_0^2 x_0^2 &= E_n \\ x_{0n} &= \sqrt{\frac{2E_n}{m\omega_0^2}} \\ &= x_0 \sqrt{2n+1} \end{aligned}$$

Lösen wir $x(t)$ nach t auf, so erhalten wir:

$$\omega_0 t \left(\frac{x}{x_0} \right) = \arcsin \frac{x}{x_0}$$

Setzen wir dies in die Verweildauer ein:

$$\begin{aligned} \rho_{cl}(x)dx &= \frac{1}{\pi x_0} \frac{dx}{\cos \omega_0 t(x)} \\ &= \frac{1}{\pi x_0} \frac{dx}{\sqrt{1 - \frac{x^2}{x_0^2}}} \end{aligned}$$

Substituieren wir nun $u = \frac{x}{x_0}$ und integrieren wir dP_{cl} :

$$\int_{-\sqrt{2n+1}}^{\sqrt{2n+1}} P_{cl}(u)du = 1,$$

folgt die echte (auf 1 normierte) Wahrscheinlichkeits-Dichte P_{cl} zu:

$$dP_{cl}(u, n) = \frac{du}{\pi \sqrt{2n+1}} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{2n+1}}} \quad (2.99)$$

Diese Funktion ist an den klassischen Umkehrpunkten gepeakt, was leicht verständlich ist: dort hat das Teilchen die minimale Geschwindigkeit, es “verbringt” dort also die meiste Zeit.

Es zeigt sich, dass die quantenmechanischen Resultate mit wachsendem n sich qualitativ dem klassischen Ergebnis annähern: die Peaks der höheren Funktionen werden außen immer höher, wie im klassischen Fall. Natürlich bleiben die Oszillationen als ein reiner Quanteneffekt erhalten, das klassische Resultat reproduziert lediglich die mittleren Trends der Wahrscheinlichkeitsdichte für $n \rightarrow \infty$.

Nullpunktsenergie und Unschärfe: Wir behaupten nun Folgendes:

Behauptung: $E_0 > 0$ ist eine Konsequenz der quantenmechanischen Unschärfe.

Beweis: Wir wissen, dass²⁵

$$\langle \Delta x^2 \rangle \langle \Delta p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

gilt. Es galt darüber hinaus für die Varianzen:

$$\begin{aligned}\langle \Delta x^2 \rangle &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \\ \langle \Delta p^2 \rangle &= \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2,\end{aligned}$$

wobei die Mittelung in einem beliebigen Zustand ψ_n erfolgt. Da $\psi_n(x)\psi_n^*(x)$ eine gerade Funktion ist, gilt

$$\langle x \rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_n(x) \psi_n^*(x) dx = 0,$$

und analog auch $\langle p_n \rangle = 0$. Setzen wir $y_n := \langle \Delta x^2 \rangle_n$, so können wir die Energie des n -ten Zustandes mit der Unschärferelation von unten abschätzen:

$$E_n = \langle \hat{H} \rangle_n = \frac{1}{2m} \langle \Delta p^2 \rangle_n + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \Delta x^2 \rangle_n \geq \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{y_n} + \frac{1}{2} m \omega^2 y_n =: f(y_n).$$

Das Minimum von $\langle \hat{H} \rangle$ finden wir nun über:

$$\frac{d}{dy_n} f(y_n) = 0 \quad \rightarrow y_{n_0} = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

Also erhalten wir:

$$\langle \hat{H} \rangle_{min} = f(y_{n_0}) = \frac{1}{2} \hbar \omega = E_0.$$

Das Ergebnis stimmt also mit den bekannten Energien ein: alle E_n sind von unten begrenzt durch E_0 , und dieser Wert ist in der Tat endlich und eine Konsequenz der Unschärferelation.

2.9.6 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Wir erinnern uns noch einmal an die Rekurrenzformeln für die Hermite-Polynome:

$$H'_n(u) = 2nH_{n-1}(u), \quad (2.100)$$

$$uH_n(u) = nH_{n-1}(u) + \frac{1}{2}H_{n+1}(u). \quad (2.101)$$

Hieraus finden wir nun analoge Rekurrenzformeln für die Oszillator-Eigenfunktionen. Zunächst multiplizieren wir (2.101) mit $C_n e^{-\frac{u^2}{2}}$:

$$\begin{aligned}u \psi_n(u) &= C_n e^{-\frac{u^2}{2}} n H_{n-1}(u) + C_n e^{-\frac{u^2}{2}} \frac{1}{2} H_{n+1}(u) \\ &= \frac{C_n \cdot n}{C_{n-1}} \psi_{n-1}(u) + \frac{C_n}{2C_{n+1}} \psi_{n+1}(u) \\ &= \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(u) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(u).\end{aligned} \quad (2.102)$$

²⁵Der Beweis folgt im Abschnitt 3.7.2.

Hierbei haben wir die nützliche Beziehung

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2n}} C_{n-1}$$

verwendet, die man leicht durch Einsetzen überprüfen kann. Nun wollen wir eine zu (2.100) analoge Beziehung für unsere Eigenfunktionen bekommen. Hier gehen wir rückwärts vor und betrachten zunächst $\psi'_n(u)$:

$$\begin{aligned} \psi'_n(u) &= -C_n u e^{-\frac{u^2}{2}} H_n(u) + C_n e^{-\frac{u^2}{2}} H'_n(u) \\ &= -u \psi_n(u) + \frac{C_n \cdot 2n}{C_{n-1}} \psi_{n-1}(u) \\ &= 2 \cdot \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(u) - u \psi_n(u) \end{aligned}$$

Hier setzen wir nun (2.102) ein:

$$\begin{aligned} \psi'_n(u) &= 2 \cdot \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(u) - \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(u) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(u) \\ \psi'_n(u) &= \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(u) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(u) \end{aligned} \quad (2.103)$$

Nun können wir aus (2.102) und (2.103) die sogenannten Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren (oder auch “Leiter-Operatoren”, “ladder operators”) gewinnen. Hierzu addieren wir die Gleichungen (2.102) und (2.103):

$$\begin{aligned} u \psi_n(u) + \psi'_n(u) &= 2 \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(u) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left[u + \frac{\partial}{\partial u} \right] \psi_n(u) &= \sqrt{n} \psi_{n-1}(u). \end{aligned}$$

Ziehen wir hingegen (2.102) von (2.103) ab, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} u \psi_n(u) - \psi'_n(u) &= 2 \cdot \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(u) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left[u - \frac{\partial}{\partial u} \right] \psi_n(u) &= \sqrt{n+1} \psi_{n+1}(u) \end{aligned}$$

Definition der “Erzeugungs”- und “Vernichtungs”-Operatoren a^\dagger und a :

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(u + \frac{\partial}{\partial u} \right) \quad (2.104)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(u - \frac{\partial}{\partial u} \right) \quad (2.105)$$

Wirkung auf die Oszillator-Eigenfunktionen:

$$\hat{a} \psi_n(u) = \sqrt{n} \psi_{n-1}(u) \quad (2.106)$$

$$\hat{a}^\dagger \psi_n(u) = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}(u) \quad (2.107)$$

Eigenschaften der Leiteroperatoren:

- Die Operatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger sind nicht selbstadjungiert, sondern paarweise adjungiert²⁶.

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{a} \varphi \rangle &= \int \psi^* \left(u \varphi + \frac{\partial \varphi}{\partial u} \right) du \\ &= \int \left(\psi^* u - \frac{\partial \psi^*}{\partial u} \right) \varphi du \\ &= \langle \hat{a}^\dagger \psi | \varphi \rangle\end{aligned}$$

- Nach der Definition sind \hat{a} und \hat{a}^\dagger reell.
- Die ψ_n sind keine Eigenfunktionen der einzelnen Operatoren \hat{a} oder \hat{a}^\dagger .
- Die ψ_n sind Eigenfunktionen des Operators $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$:

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_n &= \sqrt{n} \hat{a}^\dagger \psi_{n-1} \\ &= \sqrt{n} \sqrt{n} \psi_n \\ \hat{N} \psi_n &= n \psi_n\end{aligned}\tag{2.108}$$

Man nennt \hat{N} auch den Teilchenzahl- oder den Quantenzahl-Operator. Der Eigenwert dieses Operators ist die Quantenzahl der Wellenfunktion. Die Eigenfunktionen sind genau die Oszillatorenfunktionen, d.h. sie stimmen mit den Eigenfunktionen des Hamilton-Operators überein.

- Wir berechnen nun den Kommutator beider Operatoren: Für eine beliebige Eigenfunktion gilt

$$\begin{aligned}[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \psi_n &= \hat{a} \sqrt{n+1} \psi_{n+1} - n \psi_n \\ &= (n+1) \psi_n - n \psi_n \\ &= \psi_n\end{aligned}$$

Der Kommutator des Vernichtungs- mit dem Erzeugungsoperator ist also:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1,\tag{2.109}$$

da die Betrachtung für eine beliebige Oszillatorenfunktion durchgeführt wurde. Wegen des Superpositionsprinzips und der Vollständigkeit der Oszillatorenfunktionen gilt unsere Berechnung für beliebige Wellenfunktionen.

Darstellung wichtiger Operatoren durch die Leiteroperatoren

In diesem Abschnitt zeigen wir, dass wir aus den Operatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger viele wichtige andere Operatoren gewinnen können.

1. Für den Ortsoperator $\hat{x} = x$ folgt durch Addition der Bestimmungsgleichungen für die Operatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger :

$$\begin{aligned}\hat{a} + \hat{a}^\dagger &= \sqrt{\frac{1}{2}} \left(u + \frac{\partial}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial u} + u \right) \\ &= 2 \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{x}{x_0}\end{aligned}$$

²⁶Diese Eigenschaft und die verwendete Relation werden im nächsten Kapitel eingeführt.

Also gilt:

$$\hat{x} = (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \frac{x_0}{\sqrt{2}} \quad (2.110)$$

2. Für den Impulsoperator \hat{p} folgt analog aus Subtraktion der Gleichungen für \hat{a} und \hat{a}^\dagger :

$$\hat{p} = (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \frac{\hbar}{i} \frac{1}{x_0 \sqrt{2}} \quad (2.111)$$

3. Kommen wir nun zum Hamilton-Operator. Für den harmonischen Oszillatator galt:

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

Nach der Substitution von $u = \frac{x}{x_0}$, mit $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, folgt:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left(u^2 - \frac{d^2}{du^2} \right) \quad (2.112)$$

Wir machen nun eine kurze Nebenrechnung:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi &= \frac{1}{2} \left(u - \frac{\partial}{\partial u} \right) \left(u + \frac{\partial}{\partial u} \right) \psi \\ &= \frac{1}{2} \left(u^2 - \frac{\partial^2}{\partial u^2} + u \frac{\partial}{\partial u} - u \frac{\partial}{\partial u} - 1 \right) \psi \\ &= \frac{1}{2} \left(u^2 - \frac{\partial^2}{\partial u^2} - 1 \right) \psi, \end{aligned} \quad (2.113)$$

und erhalten als Ergebnis:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) \quad (2.114)$$

Damit ist es uns gelungen, Orts- und Impulsoperator zu eliminieren und durch die Leiteroperatoren zu ersetzen. Bemerkenswert ist der Zusatzterm $\hbar\omega/2$, der auf die Grundzustandsenergie („Vakuumenergie“) führt.

Aufgabe: Zeigen Sie, dass das Auftreten des Vakuumenergie-Terms aus der Nicht-Kommutation der Leiteroperatoren resultiert. *Hinweis:* man betrachte zusätzlich zu Glg. (2.113) den Ausdruck $\hat{a}\hat{a}^\dagger\psi$ und Vergleiche mit Glg. (2.112).

Interpretation:

- \hat{a} und \hat{a}^\dagger sind „Leiter“-Operatoren. Die Operation

$$\hat{a}^\dagger \psi_n \rightarrow \psi_{n+1}$$

entspricht einer Anregung um 1 „Sprosse“ nach oben. Hingegen bedeutet

$$\hat{a} \psi_n \rightarrow \psi_{n-1}$$

eine Abregung um 1 „Sprosse“ nach unten. Analog bedeutet die Operation mit $(\hat{a}^\dagger)^m$ eine Anregung um m Stufen (nach oben).

- Es lässt sich also jeder Zustand aus dem Grundzustand (oder “Vakuum”-Zustand, da er keine Anregungen enthält), ψ_0 , erzeugen:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0. \quad (2.115)$$

- Ebenso lässt sich ψ_0 selbst mit Hilfe von \hat{a} bestimmen. Wendet man nämlich \hat{a} auf ψ_0 an, so muss dabei die Nullfunktion entstehen, da die Wahrscheinlichkeit eines Zustandes unterhalb des Grundzustandes gleich Null ist. Es gilt damit die folgende Bestimmungs-gleichung für die Grundzustands-Wellenfunktion:

$$a\psi_0 \sim \left(u + \frac{\partial}{\partial u} \right) \psi_0 = 0 \quad (2.116)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist:

$$\psi_0 = C_0 e^{-\frac{u^2}{2}}$$

Dies ist exakt die Grundzustands-Wellenfunktion, die wir aus der Schrödinger-Gleichung gewonnen hatten.

Verallgemeinerung: Mit Hilfe der Leiter-Operatoren kommen wir zur Besetzungszahl-Interpretation. Wir abstrahieren die Energieleiter und zählen die Stufen, um von ψ_0 zu ψ_n zu kommen. Der Zustand erfordert dann n “Elementar-Anregungen”, bzw. er “enthält” dann n (Energie-)Quanten. Hierbei erzeugt \hat{a}^\dagger ein Quant und \hat{a} vernichtet eines. Der Zustand ψ_n ist dann mit n Quanten besetzt. Auch können wir in Vielteilchensystemen mit N Teilchen, von denen N_n im Zustand ψ_n sind, durch die Gesamtheit aller Besetzungszahlen N_n den vollständigen Zustand angeben²⁷,

$$|\{n_0, n_1, \dots\}\rangle, \quad \text{mit} \quad \sum_{n=0}^{\infty} N_n = N.$$

Daher ist diese Interpretation Grundlage der Methode der 2. Quantisierung, der Quantenstatistik, der Quantenfeldtheorie, der Festkörperphysik oder der Greenfunktionen. Damit können quantenmechanische Vielteilchensysteme im Gleichgewicht und Nichtgleichgewicht systematisch beschrieben werden²⁸.

²⁷Die Notation des Zustandes wird im nächsten Kapitel erläutert.

²⁸Das ist Gegenstand der Vorlesung “Quantenstatistik”, die im Sommersemester am ITAP angeboten wird.

2.9.7 Kohärente Zustände

Wir wollen uns nun noch etwas genauer mit dem Eigenwert-Problem für \hat{a} beschäftigen:

$$\hat{a}\psi_\alpha = \alpha\psi_\alpha. \quad (2.117)$$

Wir kennen mit $\alpha = 0$, also $\psi_\alpha = \psi_0$, den Spezialfall des Grundzustandes der Wellenfunktion beim harmonischen Oszillatator. Wir verallgemeinern dies nun auf $\alpha \neq 0$. Mit Sicherheit sind die entsprechenden Eigenfunktionen von \hat{a} dann keine Eigenfunktionen des harmonischen Oszillatators mehr, da wir ja gesehen hatten, dass dieser Operator den Zustand ändert. Wir fordern nun, dass ψ_α quadratisch integrierbar ist und setzen ψ_α als eine Entwicklung nach Oszillatatorzuständen an, die ja ein vollständig orthonormiertes Funktionensystem bilden,

$$\psi_\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty} D_n(\alpha)\psi_n(x), \quad D_n \in \mathbb{C}. \quad (2.118)$$

Dies setzen wir in (2.117) ein:

$$\sum_{n=1}^{\infty} D_n \sqrt{n} \psi_{n-1} = \alpha \sum_{n=0}^{\infty} D_n \psi_n.$$

Mit dieser Gleichung können wir einen Koeffizientenvergleich machen:

$$\begin{aligned} D_1 \sqrt{1} &= \alpha D_0 \\ D_2 \sqrt{2} &= \alpha D_1 \\ &\dots \\ D_n \sqrt{n} &= \alpha D_{n-1} \\ &\dots \\ &\infty \end{aligned}$$

Die rekursive Anwendung ergibt also:

$$D_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} D_0, \quad (2.119)$$

wobei wir D_0 wie üblich über die Normierung erhalten.

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_\alpha|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \sum_{n=0}^{\infty} D_n(\alpha) \psi_n(x) \right|^2 dx \\ &= D_0^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx}_{=1} := D_0^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \end{aligned}$$

Die Mischterme im Integral fallen wegen der Orthogonalität der Oszillatator-Zustände weg. Was nun noch übrig geblieben ist, ist die Taylorentwicklung von $e^{|\alpha|^2}$:

$$\begin{aligned} 1 &= D_0^2 e^{|\alpha|^2} \\ D_0 &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \end{aligned}$$

Wir erhalten also für $\alpha \in \mathbb{C}$ die sogenannten *Glauber-Zustände*²⁹:

$$\psi_\alpha(x) = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x) \quad (2.120)$$

Diese Zustände nennt man *kohärente Zustände*. Sie sind invariant unter Anwendung des Leiteroperators \hat{a} (bis auf den Faktor α , entsprechend dem Eigenwertproblem).

Eigenschaften der kohärenten Zustände:

- ψ_α ist ein Zustand minimaler Unschärfe. Es gilt also:

$$\langle \Delta x^2 \rangle_\alpha \langle \Delta p^2 \rangle_\alpha = \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.121)$$

Damit ist ψ_α ein Zustand, der dem klassischen System am nächsten kommt.

Aufgabe: Man beweise die Relation (2.121). *Hinweis:* Der Beweis verläuft analog zum Fall $\alpha = 0$, der schon zuvor besprochen wurde.

- Schauen wir uns nun die Zeitentwicklung von ψ_α an. Wir müssen also die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x, t),$$

lösen, wobei der Anfangszustand durch die stationäre Lösung gegeben sein soll,

$$\psi(x, 0) = \psi_\alpha(x).$$

Die Lösung, welche man durch Einsetzen überprüfen kann, ist hier gegeben, indem man unter der Summe den Term $\exp(-iE_n t/\hbar)$ hinzufügt:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} D_n(\alpha) \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t},$$

wobei E_n die Oszillator-Energien sind:

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2} + n\hbar\omega.$$

Man erhält also:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{-\frac{i}{2}\omega t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} [e^{-i\omega t}]^n \psi_n(x) \\ &= e^{-\frac{i}{2}\omega t} \psi_{\tilde{\alpha}}(x), \quad \text{mit} \quad \tilde{\alpha}(t) = \alpha \cdot e^{-i\omega t}. \end{aligned}$$

Vergleichen wir dies nun mit $\psi(x, 0) = \psi_\alpha(x)$. Ein Unterschied besteht nur in reinen Phasenfaktoren – im Vorfaktor und in den Koeffizienten α , die durch $\tilde{\alpha}$ ersetzt werden. Diese Phasenfaktoren werden im Betragsquadrat keine Rolle spielen. Das Wellenpaket und damit die spektrale Zusammensetzung des kohärenten Zustandes ändern sich also nicht mit der Zeit. Dies ist ein fundamentaler Unterschied zum Auseinanderlaufen des Wellenpaketes beim freien Teilchen.

²⁹Für diese und seine folgenden Arbeiten zur Quantenoptik erhielt Roy Glauber 2005 den Nobelpreis für Physik.

Dies bestätigen wir noch einmal durch direkte Rechnung: wir betrachten die Wahrscheinlichkeit, im Zustand ψ_α den Anteil des Eigenzustandes ψ_n zu beobachten bzw. die Energie $E = E_n$ zu messen.

$$P_{\psi_\alpha}(E = E_n) = e^{-|\alpha|^2} \cdot \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = P_{\psi_\alpha}(E = E_n, 0) = P(n; \alpha)$$

Diese Wahrscheinlichkeit ist also tatsächlich zeitunabhängig, und diese Betrachtung gilt gleichzeitig für alle n .

Aus diesem Resultat erkennt man auch, dass in den kohärenten Zuständen eine besondere Gewichtung der einzelnen Oszillator-Zustände vorliegt: die Wahrscheinlichkeit $P(n; \alpha)$ ist eine Poisson-Verteilung. Der Vergleich mit der Standardform einer Poissonverteilung erlaubt es sofort, den Erwartungswert und die Standardabweichung der Energie (oder der Quantenzahl n) in einem kohärenten Zustand abzulesen:

$$\bar{n} = |\alpha|^2, \quad (2.122)$$

$$\sigma_n = |\alpha| = \sqrt{\bar{n}}. \quad (2.123)$$

Insbesondere erkennt man, dass die relative Breite des Peaks der Verteilung mit wachsendem α abnimmt, d.h.

$$\delta_n = \frac{\sigma_n}{\bar{n}} = \frac{1}{\sqrt{\bar{n}}}, \quad (2.124)$$

die Verteilung nähert sich also dem klassischen Verhalten an.

Aufgabe: man zeige, dass die zeitliche Änderung des Erwartungswertes des Ortsoperators in einem kohärenten Zustand genauso erfolgt wie in der klassischen Mechanik:

$$\langle x \rangle(t) = \langle x \rangle_{\tilde{\alpha}} = \sqrt{2}x_0|\alpha| \cos(\omega t - \arg \alpha)$$

Man zeige, dass ein analoges Verhalten auch für den Erwartungswert des Impulsoperators vorliegt.

Die Oszillation des Gesamtwellenpaketes verläuft also mit der Frequenz ω , genau wie beim klassischen Teilchen. Dies ist eine Besonderheit der kohärenten Zustände und liegt in der Gaußverteilung begründet.

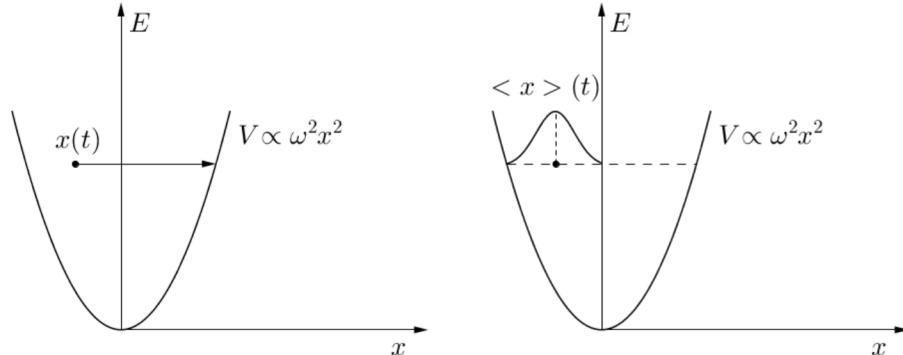


Abbildung 2.35: Links ist ein klassisch oszillierendes Teilchen im harmonischen Potential V gezeigt. Rechts sieht man ein Wellenpaket eines kohärenten Zustandes mit dem Mittelwert $\langle x \rangle(t)$, das mit der selben Frequenz oszilliert.

Die Situation ist ähnlich wie bei einem quantenmechanischen freien Teilchen, das wir auch als “Wellenpaket” dargestellt hatte. Dessen Dynamik (sein Auseinanderfließen) hatten wir in Abschnitt 2.7.2 untersucht. Der Unterschied ist nur, dass hier eine Überlagerung von Oszillator-Eigenfunktionen, dort eine Superposition ebener Wellen vorliegt.

- “Gequetschte Zustände” (squeezed states): Für Zustände minimaler Unschärfe kann man sich überlegen, dass es möglich sein sollte, die Ortsunschärfe zu verkleinern³⁰ (vergrößern), wenn man entsprechend die Impulsunschärfe vergrößert (verkleinert). In der Tat ist dies möglich, durch geeignete Superposition. Ähnlich lassen sich Zustände finden, die eine besonders scharfe Amplitude (Phase) aufweisen, wenn dies durch eine vergrößerte Unschärfe der Phase (Amplitude) kompensiert wird. Derartige Zustände sind von besonderem Interesse in der Quantenoptik, wo man quantenmechanische Zustände einzelner Photonen untersucht und an einer langen Lebensdauer (in einem Resonator) interessiert ist.

Damit haben wir unsere einführende Betrachtung der Schrödingergleichung, insbesondere die Untersuchung des Verhaltens eines quantenmechanischen Teilchens in einem externen Potential, abgeschlossen. Die Beschreibung erfolgte durch eine Wellenfunktion im Ortsraum, $\psi(\mathbf{r})$, die mit der Ortswahrscheinlichkeits-Dichte, $\rho(\mathbf{r})$, verknüpft ist. Diese erweist sich allerdings nur als ein Spezialfall der Quantenmechanik. Wir wenden uns daher nun einer allgemeineren Betrachtung zu, die die algebraischen Grundlagen der Quantenmechanik klärt. Daraus ergeben sich vielfältige mathematische Resultate zu den Eigenschaften von Zuständen und Operatoren, die für praktische Anwendungen außerordentlich wichtig sind.

³⁰Diese Zustände sind also im Ortsraum (Impulsraum) stärker lokalisiert also die ursprünglichen kohärenten Zustände, daher die Bezeichnung “gequetscht”.