3.12 Harmonischer Oszillator (QM)

[+++ August 15, http://mikomma.de/qph3htm/harmoszqm.htm]

Der harmonische Oszillator spielt bei den Quantisierungen eine zentrale Rolle, wie schon Schrödinger zeigte:

Erste Quantisierung[30]: In seiner 'Zweiten Mitteilung' zu 'Quantisierung als Eigenwertproblem' behandelt Schrödinger den 'Planckschen Oszillator'.

Zweite Quantisierung[31]: In 'Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik' führt Schrödinger kohärente Zustände ein - als 'Schulbeispiel'!.

Seither (seit 90 Jahren) borden Lehrbücher und Vorlesungsskripte über mit diesem 'Schulbeispiel'. Aber über diesem Schulbeispiel, das auch als Rechenübung gilt, ging die Physik (Schrödingers) verloren, und damit die Orientierung im 'Quantisierungsdschungel'. Wir wollen versuchen, dem Amateur diese Orientierung (zurück)zugeben.

Quantisierung als Eigenwertproblem ist Schrödingers übergreifendes Konzept, um 'seine Schrödingergleichung' an verschiedenen Beispielen (Potentialen) zu verifizieren (in concreto). Eines dieser Beispiele ist der 'Plancksche Oszillator', der heute 'harmonischer Oszillator - quantenmechanisch' heißt.

Bevor wir uns der quantenmechanischen Beschreibung des harmonischen Oszillators zuwenden, ist es vielleicht angebracht, an zwei 'äquivalente' klassische Beschreibungen zu erinnern, nämlich 'Schwingungsgleichung (Newton) ⇔ Hamiltonfunktion mit quadratischem Potential':

$$\ddot{x} = -\omega^2 x \qquad \Leftrightarrow \qquad H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \tag{3.8}$$

Die Schwingungsgleichung ergibt sich aus Newtons kausaler Beschreibung durch *Kräfte*, wobei die Erhaltung der gesamten Energie (H) eigentlich nebensächlich bzw. selbstverständlich ist, während in der Hamiltonschen Mechanik die *Energie* - also ein *Zustand* - als erstes Bewegungsintegral im Vordergrund steht. Mit den Hamiltongleichungen (für die Masse 1)

genauer gesagt die Wirkung oder das Wirkungsprinzip...

$$\frac{\partial H}{\partial x} = -\dot{p}, \qquad \frac{\partial H}{\partial p} = \dot{x} = p \tag{3.9}$$

erhält man für ein quadratisches Potential tatsächlich eine harmonische Schwingung. Aber wir wollen hier ja von der klassischen Physik zur Quantenphysik kommen:

Quantisierungen bauen auf der Hamiltonschen Mechanik auf, nach der Regel 'ersetze die *kanonischen Variablen* der Hamiltonfunktion durch Operatoren, also die Hamiltonfunktion durch den Hamiltonoperator (die Kurzsprechweise für beides ist 'der Hamilton'). In der 'Mechanik der Zustände' (also der Quantenmechanik) ist nicht die Bewegung eines Massenpunktes gesucht, sondern eine Zustandsfunktion ψ zu einem

[30] Merkspruch: Teilchen benimmt sich wie Welle.

[31] Merkspruch: Welle benimmt sich wie Teilchen.

Messwert, z.B. der Energie E. Die Gleichung für diese *erste Quantisierung* lautet in Kurzform

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{3.10}$$

und ist bekannt als *stationäre Schrödingergleichung*. Dabei handelt es sich um eine Eigenwertgleichung: gegeben ist der Operator $\hat{H}$, gesucht sind die Eigenfunktion ψ und ihre Eigenwerte E: 'Quantisierung als Eigenwertproblem' - so Schrödingers Titel seiner vier 'Mitteilungen' seiner *Wellenmechanik*. Zu den *Wellenfunktionen* $\psi(x)$ gehören unter Wirkung des Differentialoperators (analytisch) $\hat{H}$ diskrete Eigenwerte E, die man abzählen kann wie *Teilchen* (algebraisch).

Doch nun konkret zum 'harmonischen Oszillator der Quantenmechanik'. Die 1. und 2. Quantisierung spiegelt sich in den Abschnitten 'Nummerzustände' und 'kohärente Zustände' wider. [Hier nur ein Überblick. Weitere Details in Doppelspalt-Details Abschnitt 4.6]

3.12.1 Nummerzustände

Stationäre Schrödingergleichung (SGL 3.10), kanonische Quantisierung: In der Hamiltonfunktion 3.9 wird der Impuls durch den Operator $-i\hbar\partial/\partial x$ ersetzt und der so entstandene Hamiltonoperator (kurz 'Hamilton') auf eine Zustandsfunktion $\psi(x)$ angewendet. Gesucht ist die Eigenfunktion $\psi(x)$ und der Eigenwert E, der diese Gleichung erfüllt:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\psi(x) \tag{3.11}$$

Mit $\xi = x/\sqrt{\hbar/m\omega}$ hat diese Gleichung die Lösungen (Eigenfunktionen)

$$\psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} H_n(\xi)e^{-\xi^2/2} \tag{3.12}$$

mit den Eigenwerten

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{3.13}$$

Abbildung 3.3 zeigt Wellenfunktionen (analytisch) und diskrete Eigenwerte (Teilchen, algebraisch). Insofern ist das Energiespektrum schon durch den analytischen Ansatz quantisiert.

Es gibt noch eine weitere wichtige Eigenschaft des harmonischen Oszillators: Die Klammer auf der linken Seite der Schrödingergleichung 3.11 (der Hamiltonoperator) lässt sich faktorisieren. Bevor wir das tun, schaffen wir uns den lästigen Skalierungsfaktor $\sqrt{\hbar/m\omega}$ (Oszillatorlänge[32]) vom Hals, indem wir in 'quasiatomaren Einheiten'

$\boxed{m = \hbar = \omega = 1}$

[32]Oft gebraucht aber missverständlich und ohne physikalischen Hintergrund: Damit ist nur gemeint, dass es zweckmäßig ist, diese Längeneinheit bei der Behandlung des qm. harm. Osz. zu verwenden. Rein rechnerisch ist das 'der Umkehrpunkt des Oszillators im Grundzustand'.

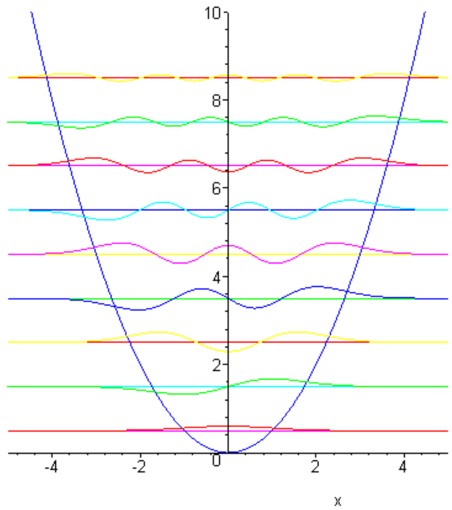

Abbildung 3.3: Eigenfunktionen und Eigenwerte des harmonischen Oszillators (QM)

rechnen, was nicht nur Schreibarbeit spart, sondern auch die Übersicht erhöht:

$$\boxed{m = \hbar = \omega = 1}$$

Mit einer weiteren Abkürzung $\partial_x = \partial/\partial x$ lautet dann die Schrödingergleichung

$$\frac{1}{2}\left(-\partial_x^2 + x^2\right)\psi_n(x) = E_n\psi(x) \tag{3.14}$$

und in faktorisierter Form (z.B. - nicht kommutativ!):

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(x - \partial_x)\frac{1}{\sqrt{2}}(x + \partial_x)\psi_n(x) = E_n\psi(x) \tag{3.15}$$

Und zu den Eigenfunktionen

$$\psi_n(x) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}} H_n(x) e^{-x^2/2} \tag{3.16}$$

gehören die Eigenwerte

$$E_n = n + \frac{1}{2} \tag{3.17}$$

Und wozu ist nun die Faktorisierung gut? Mit etwas Rechenaufwand (und den Eigenschaften der hermiteschen Polynome) findet man:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(x+\partial_x)\psi_n(x) = \sqrt{n}\psi_{n-1}(x) \tag{3.18}$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}}(x-\partial_x)\psi_n(x) = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x) \tag{3.19}$$

Das bedeutet, es gibt Operatoren, mit denen man von einer Eigenfunktion zur nächsten (nach oben oder unten) kommt, die man deshalb *Leiteroperatoren* nennt. Und welche Physik steckt hinter dieser Mathematik? Der Energieeigenwert ändert sich um 1 (in Einheiten von $\hbar\omega$), was als Absorption oder Emission eines Teilchens interpretiert werden kann (aber bitte nicht als Quantensprung!). In der Quanten*mechanik* heißen die Teilchen Phononen und in der Quanten*optik* Photonen. Schließlich kann man (mathematisch) die n-te Stufe der Leiter ausgehend vom Grundzustand $\psi_0(x)$ so erreichen:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}(x-\partial_x)^n\psi_0(x) \tag{3.20}$$

Die Leiteroperatoren sind also sehr nützlich, und wir vergeben die Namen

$$\hat{b} := \frac{1}{\sqrt{2}}(x+\partial_x) \tag{3.21}$$
$$\hat{b}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2}}(x-\partial_x) \tag{3.22}$$

Was passiert, wenn man mit diesen Operatoren (Faktoren) versucht, die Schrödingergleichung zu verifizieren (also wenn man die Klammern ausmultipliziert)? Es gibt zwei Möglichkeiten:

$$\hat{b}\hat{b}^\dagger\psi_n(x) = (n+1)\psi_n(x) \tag{3.23}$$
$$\hat{b}^\dagger\hat{b}\psi_n(x) = n\psi_n(x) \tag{3.24}$$

Leider stimmen in keinem Fall die Eigenwerte, sondern nur wenn man das arithmetische Mittel nimmt:

$$\frac{1}{2}(\hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b})\psi_n(x) = (n+\frac{1}{2})\psi_n(x) \tag{3.25}$$

Das liegt daran, dass sich die Operatoren ∂_x und x[33] und deshalb auch die Operatoren $\hat{b}^\dagger$ und $\hat{b}$ nicht vertauschen lassen. Vielmehr gilt für beide Paare

$$[\partial_x, x] = [\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1 \tag{3.26}$$

[33] Erst nach x ableiten und dann mit x multiplizieren, oder umgekehrt.

Mit anderen Worten: man kann zwar $-\partial_x^2 + x^2$ nach der 3. binomischen Formel faktorisieren, aber die so erhaltenen Faktoren sind nicht kommutativ und ergeben beim Multiplizieren (egal in welcher Reihenfolge) nicht wieder das ursprüngliche Produkt. [Anmerkungen zur Nicht-Kommutativität = 'Wesenszug der QM', Unschärfe und Vakuum...].

Aber neben den Leiteroperatoren wirft die Faktorisierung noch einen weiteren nützlichen Operator ab, nämlich $\hat{n} := \hat{b}^\dagger\hat{b}$, siehe Gleichung 3.24, also

$$\hat{n}\psi_n(x) = \hat{b}^\dagger\hat{b}\psi_n(x) = n\psi_n(x) \tag{3.27}$$

Mit $\hat{n}$ kann man leicht abfragen[34], in welchem Zustand sich der Oszillator befindet, bzw. mit 'wie vielen Phononen er besetzt ist': Besetzungszahldarstellung.

Womit sich die Schrödingergleichung, mit der wir begonnen haben, so schreibt

$$(\hat{n} + \frac{1}{2})\psi_n(x) = (n + \frac{1}{2})\psi_n(x) \tag{3.28}$$

Man kann aber in der Abstraktion noch einen Schritt weiter gehen und von der Ortsabhängigkeit der Eigenfunktionen absehen: $\psi_n(x)$ wird kurz als $|n\rangle$ notiert[35], und die SGL schreibt sich dann so:

$$\hat{H}|n\rangle = \frac{1}{2}(\hat{p}^2 + \hat{x}^2)|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{3.29}$$

Wir faktorisieren wieder den Hamiltonoperator $\hat{H}$ durch die Wahl

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}) \tag{3.30}$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p}) \tag{3.31}$$

oder nach $\hat{x}$ und $\hat{p}$ aufgelöst

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \tag{3.32}$$

$$\hat{p} = -i\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \tag{3.33}$$

Mit $[\hat{x}, \hat{p}] = i$ und $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, sowie $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ erhält man dann

$$\hat{H} = \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} = \hat{n} + \frac{1}{2} \tag{3.34}$$

sowie

[34] Es handelt sich um eine mathematische Abfrage. Realexperimente sind etwas komplizierter.

[35] Genauer gesagt: $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{3.35}$$
$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \tag{3.36}$$

Der Buchstabe a steht für annihilation und deshalb a^+ für creation...

und und kann mit dem Erzeugungsoperator $\hat{a}^\dagger$ beliebige Nummerzustände aus dem Vakuum erzeugen

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \tag{3.37}$$

[Zusammenfassung:...

A trivial generalization: Fockraum, Produktraum. Nicht zu verwechseln mit mehrdimensionalem Oszillator...]

3.12.2 Kohärente Zustände

Erwin Schrödinger hat in *Die Naturwissenschaften 14, 664 (1926)* unter dem Titel 'Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik' eine in mehrfacher Hinsicht bahnbrechende Arbeit geleistet, die er selbst aber nur als ein 'ganz besonders einfaches Schulbeispiel' einstufte (Understatement?).

Es geht darum, aus den bisher betrachteten stationären Zuständen, ein Wellenpaket zu machen, dessen Bewegung mit der Bewegung eines klassischen Teilchens 'übereinstimmt'.

$\boxed{m = \hbar = 1\ ,\ \omega = \omega}$

Dazu muss man zunächst zeitabhängige Zustände verwenden (zur besseren Lesbarkeit notieren wir wieder die Frequenz ω):

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-iE_n t} \qquad \text{mit} \qquad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\omega \tag{3.38}$$

Natürlich ist auch bei $|\psi_n(x,t)|^2$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ortsfest (stationär). Das ändert sich aber, wenn man die stationären Zustände 3.16 überlagert (wir vernachlässigen den Faktor $\pi^{-1/4}$):

ohne $\pi^{-1/4}$

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x,t) = e^{-\frac{x^2}{2} - i\,\frac{\omega}{2}t} \sum_n \frac{c_n}{\sqrt{2^n n!}} H_n(x) e^{-i\,n\omega t} \tag{3.39}$$

Nun gilt mit der erzeugenden Funktion der Hermitepolynome

$$e^{-\frac{1}{2}x^2} \sum_n \frac{s^n}{n!} H_n(x) = e^{-(\frac{1}{2}x^2 - 2sx + s^2)} = e^{-\frac{1}{2}(x-2s)^2 + s^2} \tag{3.40}$$

Damit ist jedenfalls schon ein um $2s$ verschobenes Gaußpaket (Grundzustand des Oszillators) sichtbar und wir wählen wie Schrödinger:

$$c_n = \frac{A^n}{\sqrt{2^n n!}} \qquad \text{bzw.} \qquad s = \frac{A}{2} e^{-i\,\omega t} \tag{3.41}$$

und s eingesetzt in Gl. 3.40 ergibt

$$\begin{aligned} \psi(x,t) &= e^{-\frac{1}{2}x^2 - i\,\frac{\omega}{2}t} \sum_n \left(\frac{A}{2} e^{-i\,\omega t}\right)^n \frac{1}{n!} H_n(x) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}(x^2 + i\,\omega t) - \frac{A^2}{4} e^{-i\,2\omega t} + A x e^{-i\,\omega t}\right) \end{aligned} \tag{3.42}$$

Bevor wir diese Funktion näher betrachten, bilden wir zunächst zur Probe das Betragsquadrat:

zweckmäßiger Weise mit einem geeigneten Programm

$$|\psi(x,t)|^2 = \mathrm{e}^{\frac{A^2}{2}} \mathrm{e}^{-(x - A\cos(\omega\,t))^2} \tag{3.43}$$

Erfreulicherweise oszilliert ein Gaußpaket mit der Amplitude A und der Oszillatorfrequenz ω. Aber wie schon in Gleichung 3.40 abzusehen war, sollten wir zur Normierung von $\psi(x,t)$ den Faktor $e^{-|s|^2} = e^{-A^2/4}$ hinzufügen:

$$c_n^2 = e^{-\frac{A^2}{2}} \frac{A^{2n}}{2^n n!} = e^{-\bar{n}} \frac{\bar{n}^n}{n!} \tag{3.44}$$

was eine Poissonverteilung zur 'mittleren Quantenzahl' $\bar{n} = A^2/2$ ist. Mit anderen Worten:

Die Überlagerung der stationären Zustände des (quantenmechanischen) harmonischen Oszillators mit den Gewichten einer Poissonverteilung zur mittleren Energie $\bar{n}\hbar\omega$ liefert ein harmonisch mit der Amplitude A schwingendes Wellenpaket, das seine Form nicht ändert.

Doch nun zu den Details von Gl. 3.42: Die zeitliche Entwicklung der komplexen Amplitude eines kohärenten Zustands lässt sich am besten durch eine Animationen, siehe http://www.mikomma.de/qph3htm/harmoszqm.htm veranschaulichen. Die Abbildung 3.4 zeigt drei Momentaufnahmen.

alternativ: Feynman-Propagator!

Betrachtet man die Abbildung der komplexen Amplitude von der Seite, so sieht man den Realteil

$$\Re(\psi(x,t)) = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(x - A\,\cos(\omega\,t))^2} \cos\left[A\sin(\omega\,t)\left(x - \frac{A}{2}\cos(\omega\,t)\right) + \frac{\omega}{2}t\right] \tag{3.45}$$

dessen zeitliche Entwicklung in drei Momentaufnahmen in Abb. 3.5 dargestellt ist:

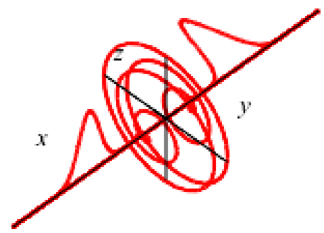

Abbildung 3.4: 'Gaußscher Korkenzieher': Das Gaußpaket startet mit einer reellen Amplitude. Im Nulldurchgang wird daraus ein Wellenpaket mit kürzester Wellenlänge. Am gegenüberliegenden Umkehrpunkt ist das Gaußpaket rein imaginär.

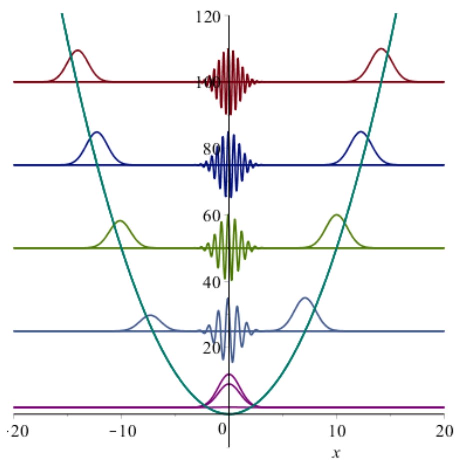

Abbildung 3.5: Realteil für t=0, T/4 und T/2 (gemogelt)

Schrödinger schreibt dazu:

Die gesamte Ausdehnung der Wellengruppe ('Dicke des Massenpunktes') bleibt jedoch stets dieselbe. Die Veränderlichkeit der 'Kräuselung' ist als eine Abhängigkeit von der Geschwindigkeit aufzufassen und als solche nach allgemeinen undulationsmechanischen Gesichtspunkten vollkommen verständlich, doch möchte ich an dieser Stelle hierauf nicht näher eingehen. Unsere Wellengruppe hält dauernd zusammen, breitet sich nicht im Laufe der Zeit auf ein immer größeres Gebiet aus, wie man es sonst, z. B. in der Optik, gewohnt ist.

Wir wollen hier etwas näher darauf eingehen: Die Einhüllende ist ein Gaußpaket mit fester Breite, das mit der Amplitude A und der Frequenz ω schwingt. Der cos-Term stellt eine 'ebene Welle' mit der Wellenzahl $A \sin(\omega t)$ dar, die mit der halben Amplitude $A/2$ und der Frequenz ω schwingt, und zusätzlich mit der Frequenz des

Grundzustands ($\omega/2$) Phase aufsammelt. Die Wellenzahl (oder der Impuls) ändert sich also um 90° phasenverschoben zum Ort - wie es sein muss.

Schrödinger schreibt weiter:

Es läßt sich mit Bestimmtheit voraussehen, daß man auf ganz ähnliche Weise auch die Wellengruppen konstruieren kann, welche auf hochquantigen Keplerellipsen umlaufen und das undulationsmechanische Bild des Wasserstoffelektrons sind; nur sind da die rechentechnischen Schwierigkeiten größer als in dem hier behandelten, ganz besonders einfachen Schulbeispiel.

Und das ist ebenfalls bahnbrechend: Die Überlagerung stationärer Zustände ist ein Grundprinzip beim stetigen Übergang von der Mikro- zur Makromechanik. Leider wurde das mit dem Quantensprung abgeschafft und vergessen. Links zu Rydbergatomen usw.: Stationäre Zustände sind die Ausnahme (Rechenhilfen als Basis - ONB). Die Regel ist ihre Überlagerung - mit kontinuierlichem Ergebnis.

Wie bei den Nummerzuständen gehen wir von der Ortsdarstellung zur Energiedarstellung über. Formal ist dieser Übergang sehr einfach, aber es steckt in diesem Übergang sehr viel Physik, was insbesondere Roy Glauber erkannt hat, nämlich die kohärenten Zustände des elektromagnetischen Feldes: PHYSICAL REVIEW VOLUME 131, NUMBER 6, 15 SEPTEMBER 1963, 'Coherent and Incoherent States of the Radiation Field' ist eine weitere Geburtsstunde der Quantenoptik! Wir verwenden dazu die von Glauber eingeführten Bezeichnungen. Mit

$$|\alpha|^2 = \bar{n} = \frac{A^2}{2} \tag{3.46}$$

schreiben sich kohärente Zustände $|\alpha\rangle$ so

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \left(\hat{a}^\dagger\right)^n |0\rangle \tag{3.47}$$

Woraus sich mit $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ eine 'Eigenwertgleichung' für $\hat{a}$ ergibt:

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{3.48}$$

dabei steht 'Eigenwertgleichung' in Anführungszeichen, weil $\hat{a}$ nicht hermitesch ist und deshalb α nicht reell sein muss. [alternanive Formulierung in reste.tex]

'Erzeugung eines kohärenten Zustands aus dem Vakuum'...

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle \tag{3.49}$$

Schließlich erwähnen wir noch die Wahrscheinlichkeitsamplitude, bzw. die Wahrscheinlichkeit, bei einer Messung an einem kohärenten Zustand $|\alpha\rangle$, einen Nummerzustand $|n\rangle$ vorzufinden:

$$c_n = \langle n|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \qquad \text{bzw.} \qquad |c_n|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \tag{3.50}$$

Poissonverteilung mit $|\alpha|^2 = \bar{n}$ - wie gehabt!

Aber das sind nicht nur Abkürzungen der Schreibweise. Dahinter steckt die Physik Glaubers oder die Geburt der Theorie zur Quantenoptik, siehe 'Quantisierung des em. Feldes' (nächster Abschnitt).

[Verschiebungsoperator...]

[%%% Notizen und Ketzereien...]