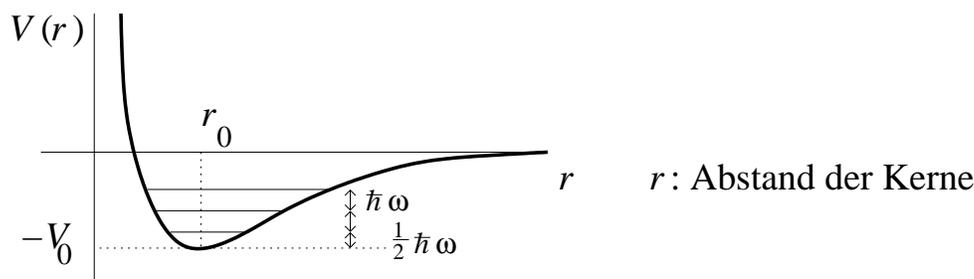


7.6 Anwendung

Kernschwingungen in einem zweiatomigen Molekül.



Für Schwingungen kleiner Amplitude:

$$V(r) = -V_0 + \frac{1}{2}m\omega^2(r - r_0)^2$$

für reduzierte Masse m mit $\frac{1}{m} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$

- Mögliche Energien der Schwingungszustände:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega - V_0 \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Grundzustand: $E_0 = -V_0 + \frac{1}{2}\hbar\omega$, Unschärfe $\Delta r = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$. (Unsere Näherung, $V(r)$ durch das Potential eines harmonischen Oszillators zu ersetzen, ist nur gültig, wenn $\Delta r \ll r_0$.)

Experimentell kann man $\hbar\omega$ spektroskopisch bestimmen: Übergänge zwischen den Schwingungszuständen finden mit Absorption/Emission eines Photons mit Energie $\hbar\omega$ statt (für heteropolare Moleküle), oder mit Absorption und Reemission zweier Photonen mit Energiedifferenz $\hbar\omega$ ("Raman-Streuung"). Typische Schwingungsfrequenzen: $\omega \sim 10^{11}$ Hz (infrarot).

7.7 Kohärente Zustände

Vergleichen wir nun den quantenmechanischen harmonischen Oszillator mit dem klassischen harmonischen Oszillator. Der klassische harmonische Oszillator wird durch die Hamiltonfunktion

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

beschrieben. Die Hamilton-Jacobi Gleichungen für x und p sind dann

$$\dot{x} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -m\omega^2 x.$$

Die allgemeine Lösung dieser Gleichungen ist (mit z einer komplexen Zahl):

$$x = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re} \{ze^{-i\omega t}\}, \quad p = \sqrt{2\hbar m\omega} \operatorname{Im} \{ze^{-i\omega t}\}.$$

In dieser Notation findet man, dass $H = \hbar\omega|z|^2$. In dimensionlosen Variablen wird diese Lösung als

$$\tilde{x} = \frac{x}{x_0} = \sqrt{2} \operatorname{Re} \{ze^{-i\omega t}\}, \quad \tilde{k} = \frac{px}{\hbar} = \sqrt{2} \operatorname{Im} \{ze^{-i\omega t}\}$$

oder

$$a(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{x}(t) + i\tilde{k}(t)) = ze^{-i\omega t}$$

dargestellt.

Die stationären Zustände $|n\rangle$, die Eigenzustände des quantenmechanischen Hamilton-Operators sind, haben nicht die Eigenschaften des klassischen harmonischen Oszillators: In den stationären Zuständen $|n\rangle$ sind die Wahrscheinlichkeitsverteilungen vom Ort x und Impuls p zeitunabhängig, während x und p beim klassischen harmonischen Oszillator zeitabhängig sind. Spezifischer: in den stationären Zuständen $|n\rangle$ findet man

$$\bar{x} = 0, \quad \bar{p} = 0,$$

während x und p nicht null und zeitabhängig sind.

Wir haben schon gesehen, dass $\bar{x} = 0$ und $\bar{p} = 0$ für den Grundzustand. Dass $\bar{x} = 0$ und $\bar{p} = 0$ für beliebige $|n\rangle$ gilt, kann man beweisen, indem man die Operatoren \hat{x} und \hat{p} durch die Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger ausdrückt,

$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{ix_0\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger).$$

Da

$$\langle n|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\langle n|n-1\rangle = 0$$

und

$$\langle n|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle n|n+1\rangle = 0$$

folgt, dass

$$\bar{x} = \langle n|\hat{x}|n\rangle = 0 \quad \text{und} \quad \bar{p} = \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0.$$

Die Energieeigenzustände $|n\rangle$ stellen deshalb nicht die Oszillationsbewegung des klassischen harmonischen Oszillators dar. Wir wollen jetzt Zustände konstruieren, für die die Erwartungswerte \bar{x} und \bar{p} die klassischen Schwingungen zeigen, und für die die Unschärfe in x und p minimal ist. Solche Zustände werden kohärente Zustände genannt. Um die Diskussion zu vereinfachen, werden wir die dimensionslosen Koordinaten \tilde{x} und \tilde{k} benutzen, anstatt x und p .

In einem Zustand mit $\tilde{x} \neq 0$ und $\tilde{k} \neq 0$ muss auch

$$\bar{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{x} + i\tilde{k}) \neq 0.$$

Ein kohärenter Zustand $|z\rangle$ ist definiert als ein normierter Zustand mit

$$\bar{a} = \langle z|\hat{a}|z\rangle = z \quad \text{und} \quad \overline{\hat{a}^\dagger \hat{a}} = \langle z|\hat{a}^\dagger \hat{a}|z\rangle = |z|^2.$$

Ein solcher Zustand entspricht maximal den Anforderungen eines klassischen Teilchens, da für ein klassisches Teilchen \tilde{x} und \tilde{k} reelle Zahlen sind, nicht Operatoren, so dass

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{x} + i\tilde{k}) \text{ „}=\text{“ } z \quad \text{und} \quad \hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{\tilde{x}^2 + \tilde{k}^2}{2} \text{ „}=\text{“ } |z|^2.$$

Die kohärenten Zustände haben folgende Eigenschaften:

- Die Observablen \tilde{x} und \tilde{k} haben den Erwartungswert

$$\bar{\tilde{x}} = \sqrt{2}\text{Re } z(t), \quad \bar{\tilde{k}} = \sqrt{2}\text{Im } z(t).$$

Beweis: Es gilt

$$\begin{aligned}
 \bar{x} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle z | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | z \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle z | \hat{a} | z \rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle z | \hat{a}^\dagger | z \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle z | \hat{a} | z \rangle + \langle z | \hat{a} | z \rangle^*) \\
 &= \sqrt{2} \operatorname{Re} z,
 \end{aligned}$$

und ähnlich für \bar{k} .

- $|z\rangle$ ist ein \hat{a} -Eigenzustand, mit Eigenwert z , d.h. $\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle$.

Beweis: Berechne das Skalarprodukt von $(\hat{a} - z)|z\rangle$ mit sich selbst:

$$\begin{aligned}
 \|(\hat{a} - z)|z\rangle\|^2 &= \langle z | (\hat{a}^\dagger - z^*) (\hat{a} - z) | z \rangle \\
 &= \langle z | (\hat{a}^\dagger \hat{a} - z^* \hat{a} - z \hat{a}^\dagger + z z^*) | z \rangle \\
 &= \langle z | \hat{a}^\dagger \hat{a} | z \rangle - z^* \langle z | \hat{a} | z \rangle - z \langle z | \hat{a}^\dagger | z \rangle + z z^* \langle z | z \rangle \\
 &= |z|^2 - z^* z - z z^* + |z|^2 \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

Hieraus ergibt sich, dass $(\hat{a} - z)|z\rangle = 0$.

- Man kann die kohärenten Zustände in der Basis der Energieeigenzustände entwickeln:

$$|z\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$

Beweis: Man findet, dass

$$\begin{aligned}
 \hat{a}|z\rangle &= e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} \hat{a}|n\rangle \\
 &= e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{(n-1)!}} |n-1\rangle \\
 &= z e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\
 &= z|z\rangle.
 \end{aligned}$$

- Normierung der kohärenten Zustände:

$$\langle z|z\rangle = e^{-|z|^2} \sum_{n'=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z'^*)^{n'} z^n}{\sqrt{n'!n!}} \langle n'|n\rangle = e^{-|z|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|z|^{2n}}{n!} = 1.$$

- Zeitabhängigkeit der kohärenten Zustände:

$$|z(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} |ze^{-i\omega t}\rangle.$$

Da der Operator \hat{a} in dem kohärenten Zustand den Erwartungswert z hat, sind die Erwartungswerte vom Ort x und Impuls p die gleichen wie in der klassischen Theorie. Konkret:

$$\overline{\tilde{x}(t)} = \sqrt{2}\operatorname{Re} z(t) = \sqrt{2}\operatorname{Re} ze^{-i\omega t}, \quad \overline{\tilde{k}(t)} = \sqrt{2}\operatorname{Im} z(t) = \sqrt{2}\operatorname{Im} ze^{-i\omega t}.$$

Dies sind die gleichen Oszillationen wie für den klassischen Oszillator.

Beweis: Für Energie-Eigenzustände gilt, dass

$$|n(t)\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle = e^{-i\omega t/2 - i\omega n t} |n\rangle.$$

Damit findet man

$$\begin{aligned} |z(t)\rangle &= e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega t/2 - i\omega n t} |n\rangle \\ &= e^{-i\omega t/2} e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ze^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ &= e^{-i\omega t/2} |ze^{-i\omega t}\rangle. \end{aligned}$$

- In den kohärenten Zuständen $|z\rangle$ sind die Streuungen des Ortes x und des Impulses p minimal, d.h., entsprechen denen im Grundzustand $|0\rangle$.

Beweis: Übung.