



universität
wien

DIPLOMARBEIT / DIPLOMA THESIS

Titel der Diplomarbeit / Title of the Diploma Thesis

**„Vom klassischen zum quantenmechanischen harmonischen
Oszillator und darüber hinaus“**

verfasst von / submitted by

Martin Wiederstein

angestrebter akademischer Grad / in partial fulfilment of the requirements for the degree of

Magister der Naturwissenschaften (Mag. rer. nat.)

Wien, 2019 / Vienna, 2019

Studienkennzahl lt. Studienblatt /
degree programme code as it appears on
the student record sheet:

A190 445 412

Studienrichtung lt. Studienblatt /
degree programme as it appears on
the student record sheet:

Lehramtsstudium UF Biologie
und Umweltkunde UF Physik

Betreut von / Supervisor:

Mag. Dr. Beatrix Hiesmayr, Privatdoz.

"You know, the most amazing thing happened to me tonight. I was coming here, on the way to the lecture, and I came in through the parking lot. And you won't believe what happened. I saw a car with the license plate ARW 357. Can you imagine? Of all the millions of license plates in the state, what was the chance that I would see that particular one tonight? Amazing!"

— Richard P. Feynman

Exposé

Harmonische Oszillatoren haben in der theoretischen Physik eine fundamentale Bedeutung und lassen sich in diversen Teilbereichen davon als mathematisches Modell wiederfinden. Ziel dieser Arbeit ist es, eine übersichtliche Abhandlung über harmonische Oszillatoren zu präsentieren, die über einen einheitlichen Formalismus verfügt und es somit ermöglicht klassische und quantenmechanische Systeme gegenüberzustellen und zu vergleichen. Dabei werden insbesondere

- eindimensionale harmonische Schwingungen nach newtonscher Mechanik,
- allgemeine Lösungen der klassischen, eindimensionalen harmonischen Schwingung,
- klassische harmonische Schwingungen in der hamiltonschen Dynamik,
- quantenmechanische harmonische Oszillatoren,
- die Lösung der Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators sowohl als Differentialgleichung als auch algebraisch per Leiteroperatoren,
- stationäre und zeitabhängige Lösungen der Schrödingergleichung,
- der klassische Grenzfall und kohärente quasi-klassische Zustände
- sowie modernere Konzepte wie Supersymmetrien oder Gitterschwingungen der Festkörperphysik behandelt.

Durch eine stringente und detaillierte mathematische Darstellung dieser Themen, soll diese Arbeit für Lehramts- und Bachelorstudent*innen eine Ressource darstellen, welche in den Vorlesungen von Priv. Doz. Dr. Beatrix Hiesmayr zur Verfügung gestellt werden kann.

Inhaltsverzeichnis

1	Der harmonische Oszillator in der klassischen Physik	1
1.1	Einstieg: Die eindimensionale harmonische Schwingung nach newton-scher Mechanik	1
1.2	Die allgemeine Lösung der klassischen, eindimensionalen harmoni-schen Schwingung nach Newton	8
1.3	Die harmonische Schwingung in der klassischen Hamiltondynamik . .	11
1.3.1	Der mehrdimensionale harmonische Oszillator	12
2	Der harmonische Oszillator in der Quantenmechanik	14
2.1	Vom klassischen zum quantenmechanischen harmonischen Oszillator .	14
2.2	Lösung der Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators auf dem algebraischen Weg	16
2.2.1	Eigenfunktionen und Eigenenergiewerte angeregter Zustände .	22
2.2.2	Die Nullpunktenergie	28
2.3	Lösung der Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators als Differentialgleichung	29
2.4	Es wird Zeit für t : Kohärente und quasi-klassische Zustände	33
3	Vergleich des klassischen und quantenmechanischen harmonischen Oszillators	37
3.1	Vergleich klassischer und quantenmechanischer Aufenthaltswahrscheinlichkeit	37
3.2	Ein quantenmechanischer harmonischer Oszillator in Menschengröße .	43
3.3	Zusammenfassung des harmonischen Oszillators bisher	44
4	Der harmonische Oszillator in der modernen Physik	47
4.1	Auf zur zweiten Quantisierung: Die Teilchen vermehren sich	47
4.2	Gitterschwingungen in der Festkörperphysik	50
4.3	Von der Besetzungszahldarstellung zu Fermionen und Bosonen	55

4.4	Wer ist SUSY und wie wandelt sie Fermionen und Bosonen ineinander um? Der harmonische Oszillator in der Supersymmetrie	61
4.4.1	Fermionen und Bosonen können auch schwingen	61
4.4.2	Aus Zwei mach Eins: Supersymmetrische Superpartner	63
4.5	Zusammenfassung Teil zwei	66
5	Literaturverzeichnis	68
6	Abbildungsverzeichnis	70

1 Der harmonische Oszillator in der klassischen Physik

1.1 Einstieg: Die eindimensionale harmonische Schwingung nach newtonscher Mechanik

Als Erstes wird der harmonische Oszillator im Formalismus der klassischen Mechanik nach Newton betrachtet. Vereinfacht ausgedrückt, ist ein *Oszillator* ein mathematisch-physikalisches Modellsystem, bei welchem wiederholte zeitliche Änderungen von physikalischen Größen auftreten. Dabei werden einige Oszillationen unterschieden: periodische oder chaotische; gedämpfte oder ungedämpfte; freie oder erzwungene; lineare oder nichtlineare; Oszillationen mit einem, mit mehreren oder gar unendlichen Freiheitsgraden; Oszillationen zwischen diskreten Zuständen und Oszillationen innerhalb kontinuierlichen Systemen.

Diese Arbeit beschränkt sich jedoch auf die *harmonische Oszillation*, wobei zunächst geklärt werden muss was in diesem Kontext *harmonisch* bedeutet. Dies soll mit der Visualisierung eines recht simplen Systems beginnen: einem Federpendel. Man stelle sich eine Feder vor, deren erstes Ende an einem unbeweglichen Objekt fixiert ist. An dem zweiten Ende ist ein bewegliches Objekt mit Masse m und das System befindet sich in einer *Ruhelage* – d. h. nichts bewegt sich (siehe Abb. 1.1).

Nun wird dieses System bewegt: Es wird an der beweglichen Masse parallel zur Achse der Feder gezogen. Die Masse beginnt hin und her zu schwingen, da sie dem Einfluss einer *Rückstellkraft* unterliegt. Eine solche Kraft wirkt entgegen der Auslenkung in Richtung der Ruhelage. Salopp ausgedrückt: Diese Kraft will das System eben 'zurückstellen'. Unterliegt die Feder dem *hookschen Gesetz*, welches besagt, dass die Kraft proportional zur Auslenkung ist, dann wird das System als *harmonischer Oszillator* bezeichnet.¹

¹vgl. Nolting (2014), S. 116f.

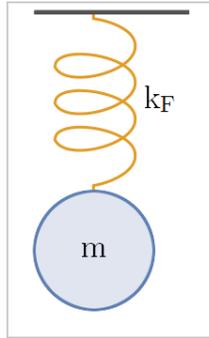


Abbildung 1.1: Zu erkennen ist ein simples Modell eines Federpendels. Es besteht aus einer Feder (Organe) mit der Federkonstante k_F , an welcher eine Masse m befestigt ist (Blau). Die Feder ist an einem unbeweglichen Objekt (Grau) fixiert, sodass bei einer Auslenkung der Masse, diese durch die Feder wieder in ihre Ruheposition gebracht wird. Die Gravitationskraft, die auf dieses System wirkt, wird dabei vernachlässigt.

Obwohl dieses System vorerst noch simpel wirkt, wird im Laufe der Arbeit die Beschreibung der harmonischen Oszillation zunehmend abstrakter und komplizierter. Daher werden nun einige nützliche Grundbegriffe und Konzepte anhand des Federpendels detailliert beschrieben, um einen brauchbaren Ausgangspunkt für komplexere Phänomene zu etablieren.

Wie oftmals in der theoretischen Physik ist zunächst die Bewegungsgleichung des Systems interessant. Da newtonsche Mechanik betrieben werden soll, ist es sinnvoll mit dem zweiten newtonschen Axiom zu beginnen²:

$$F = m a = m \ddot{x}. \quad (1.1)$$

Da nur eine Kraft auf das System wirkt – die Rückstellkraft – gilt für die Kraft auch

$$F = -k_F x, \quad (1.2)$$

wobei k_F eine phänomenologische Konstante – die *Federkonstante*³ – darstellt. Aus diesen Gleichungen kann eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung gewon-

²vgl. Embacher (2010), S. 11

³vgl. Embacher (2010), S. 16

nen werden⁴:

$$\begin{aligned} F &= -k_F x \\ F &= m \ddot{x} \\ \Rightarrow m \ddot{x}(t) &= -k_F x(t). \end{aligned} \tag{1.3}$$

Auf der rechten Seite der Gleichung (1.3) steht eine Funktion mit einem negativen Vorzeichen und auf der linken Seite die zweite Ableitung dieser Funktion. Eine Lösung dieser Differentialgleichung stellt also eine Funktion dar, dessen zweite Ableitung ein negatives Vorzeichen hat. Somit wären die Sinus- bzw. Cosinusfunktionen nützliche Kandidaten, da sie über genau diese Eigenschaft verfügen. Da Sinus- bzw. Cosinusfunktionen essentiell dieselbe Funktion sind – abgesehen von einer Phasenverschiebung von $\varphi = \pi/2$ – ist es irrelevant ob Sinus oder Cosinus für die Lösung herangezogen wird.

Zunächst ist es jedoch interessant die *Phasenverschiebung*, oder auch schlicht *Phase* φ genannt, zu diskutieren. Welchen Nutzen hat diese? Physikalisch betrachtet ist die Phase eine Möglichkeit verschiedene Startbedingungen des Systems festzulegen: Die Bewegung in eine Richtung vom Equilibrium weg ($\varphi = 0$); die Bewegung vom Equilibrium aus in die andere Richtung ($\varphi = \pi$); die Position bei der maximalen Auslenkung ($\varphi = \pi/2$); die Position bei der gegenüberliegenden maximalen Auslenkung ($\varphi = 3\pi/2$) oder jegliche andere Startposition ($\varphi = \textit{whatever}$) mit $\varphi \in \mathbb{R}$. Diese verschiedenen Startpositionen sind auf Abb. 1.2 dargestellt.

Da die Lösung der Differentialgleichung (1.3) den Ort x als eine trigonometrische Funktion der Zeit t festlegt, müssen in der Sinusfunktion anfallende Koeffizienten *dimensionslos* sein. Die einzige 'Einheit', die in trigonometrischen Funktionen vorkommen kann, ist schließlich der *Radian*. Mathematisch betrachtet ist die Phase ein Winkel, der über das Verhältnis der Bogenlänge s zum Radius r definiert ist, was wie gewünscht dimensionslos ist:

$$\varphi = \frac{s}{r} \quad \Rightarrow \quad \left[\textit{rad} = \frac{m}{m} = \textit{'dimensionslos'} \right]. \tag{1.4}$$

⁴vgl. Embacher (2010), S. 29

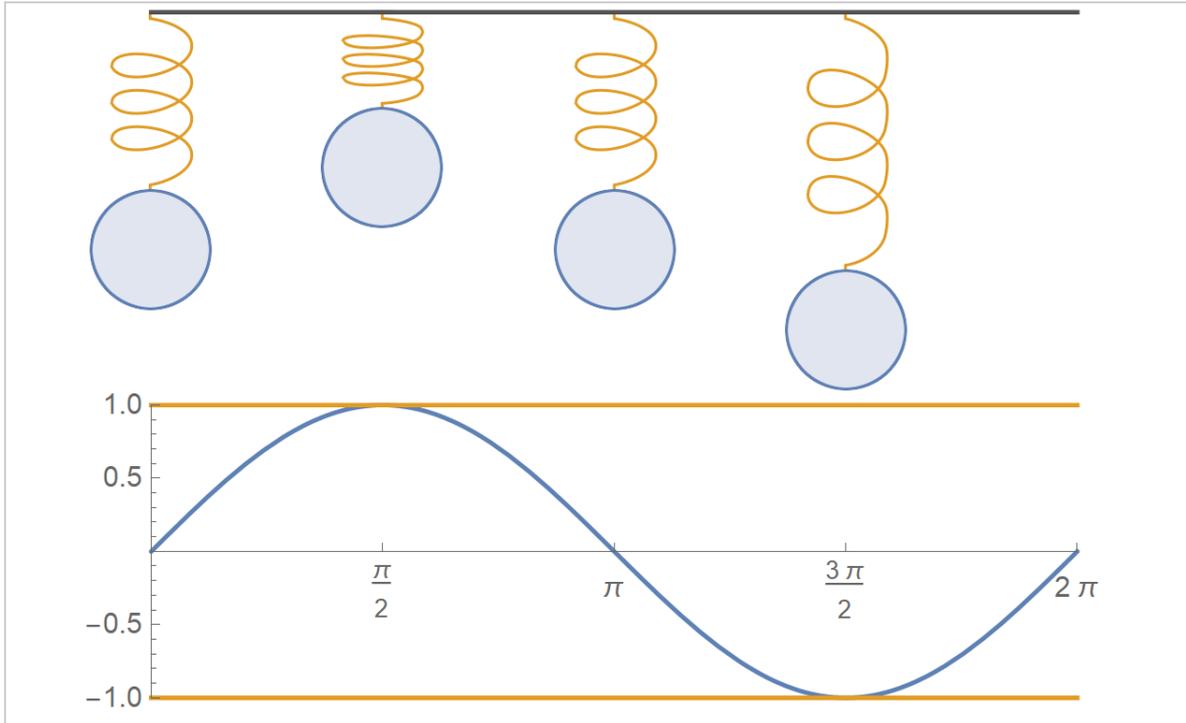


Abbildung 1.2: Hier ist das modellhafte Federpendel mit vier verschiedenen Startbedingungen über einem Plot der Sinusfunktion dargestellt. Bei $\varphi = 0$ befindet sich die Masse im Gleichgewicht und bewegt sich in Richtung Maximum, welches bei $\varphi = \pi/2$ erreicht wird. Bei $\varphi = \pi$ hingegen bewegt sich die Masse in Richtung des anderen Maximums, welches bei $\varphi = 3\pi/2$ erreicht wird. Alternativ können statt den unterschiedlichen Startbedingungen auch unterschiedliche Zeitpunkte vorgestellt werden. Da schließlich nur der Input einer Sinusfunktion relevant ist, ist es ganz gleich ob dieser durch φ , ωt oder einer Kombination dieser zustande kommt.

Nun muss auch die Inputvariable Zeit t entdimensionalisiert werden. Dazu wird die *Winkelgeschwindigkeit* ω eingeführt, die die Änderungsrate des Phasenwinkels φ mit der Zeit angibt:

$$\omega = \frac{d\varphi}{dt}. \quad (1.5)$$

Die Winkelgeschwindigkeit ω verfügt über die SI-Einheit von Radiant pro Sekunde:

$$[\omega] = \left[\frac{\text{rad}}{\text{s}} = \text{s}^{-1} \right]. \quad (1.6)$$

Da der harmonische Oszillator ein periodisches System darstellt, kann eine Zeit definiert werden, nach welcher der Ausgangszustand wieder erreicht wird. Diese Zeit-

spanne wird als *Periode* τ bezeichnet.⁵ Die *Frequenz* f hingegen ist die Rate, mit welcher periodische Ereignisse stattfinden. Mathematisch ist sie der Kehrwert der Periode τ :

$$f = \frac{1}{\tau} \quad \Leftrightarrow \quad \tau = \frac{1}{f}. \quad (1.7)$$

Zurück zur Lösung Differentialgleichung: Soweit wurde eine Sinusfunktion mit einer Phase und der Zeit als Inputvariable in Kombination mit der Winkelgeschwindigkeit als passabler Kandidat festgestellt: $\sin(\omega t + \varphi)$.

Die Winkelgeschwindigkeit ω gibt die Radianen pro Sekunde an und die Frequenz f gibt die 'Anzahl an Ereignissen' pro Sekunde an. Eine Sequenz an Ereignissen, die sich wiederholt, kann als *Zyklus* bezeichnet werden. Die Sinusfunktion wiederholt sich nachdem 2π durchlaufen wurden. Da sich zudem die Bewegung eines harmonischen Oszillators per Definition nach einem *Zyklus* der Dauer τ wiederholt, kann

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{\varphi}{t} = \frac{2\pi \text{ rad}}{1 \text{ Periode}} \\ f &= \frac{1 \text{ Zyklus}}{1 \text{ Periode}} \\ \Rightarrow \frac{\omega}{f} &= \frac{2\pi \text{ rad}}{1 \text{ Zyklus}} = 2\pi \\ \Rightarrow \omega &= 2\pi f. \end{aligned} \quad (1.8)$$

aufgestellt werden.

Damit wurde vorerst der Input der trigonometrischen Lösung der Differentialgleichung ausreichend untersucht. Was ist jedoch der Output der Lösung? Bisher nur dasselbe wie der Output einer Sinusfunktion: eine Zahl zwischen -1 und $+1$. Da dies physikalisch nicht besonders sinnvoll ist, wird eine neue Größe A eingeführt, die die Extremwerte der Funktion als $-A$ und $+A$ definiert. Diese Größe wird Amplitude genannt.

⁵vgl. Embacher (2010), S. 30

Somit kann anhand dieser Überlegungen eine plausible Lösung für (1.3) erhalten werden:

$$x(t) = A \sin(\omega t + \varphi). \quad (1.9)$$

Dies kann nun in die Differentialgleichung (1.3) eingesetzt werden, wodurch ein interessanter Zusammenhang zwischen Federkonstante k_F , Winkelgeschwindigkeit ω und der Masse m auffällt:

$$\begin{aligned} m \ddot{x}(t) &= -k_F x(t) \\ \Rightarrow -\frac{k_F}{m} A \sin(\omega t + \varphi) &= -\omega^2 A \sin(\omega t + \varphi) \\ \Rightarrow \omega &= \sqrt{\frac{k_F}{m}}. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Jetzt stellt sich die Frage, wie sich die potentielle Energie U und die kinetische Energie T des harmonischen Oszillators verhalten. Die kinetische Energie T ist wie in anderen Systemen der newtonschen Mechanik $\frac{1}{2} m \dot{x}^2$.

Da die Kraft beim harmonischen Oszillator erhalten bleibt, lässt sich die potentielle Energie U als das negative Integral besagter Kraft definieren:

$$U = - \int F dx = \int k_F x dx. \quad (1.11)$$

Mit (1.10) wird somit

$$U = \int m \omega^2 x dx = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (1.12)$$

erhalten, womit sich für die Gesamtenergie der Ausdruck

$$E_{ges} = T + U = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (1.13)$$

ergibt.⁶ In diesen kann die Lösung (1.9) eingesetzt werden, wodurch

$$\begin{aligned} E_{ges} &= \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \\ &= \frac{1}{2} m \omega^2 [A^2 \sin^2(\omega t + \varphi) + A^2 \cos^2(\omega t + \varphi)] \\ &= \frac{1}{2} m \omega^2 A^2 \end{aligned} \quad (1.14)$$

⁶vgl. Embacher (2010), S. 37

erhalten wird. Daraus folgen gleich zwei interessante Zusammenhänge: Zum einen kann die Amplitude als

$$A = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E_{ges}}{m}} \quad (1.15)$$

angeschrieben werden und zum anderen ist ersichtlich, dass T und U gegenphasig oszillieren:

$$\begin{aligned} E_{ges} &= \frac{1}{2} m \omega^2 [A^2 \sin^2(\omega t + \varphi) + A^2 \cos^2(\omega t + \varphi)] \\ \Rightarrow T &\propto \sin^2(\omega t + \varphi) \quad \text{und} \\ \Rightarrow U &\propto \cos^2(\omega t + \varphi). \end{aligned} \quad (1.16)$$

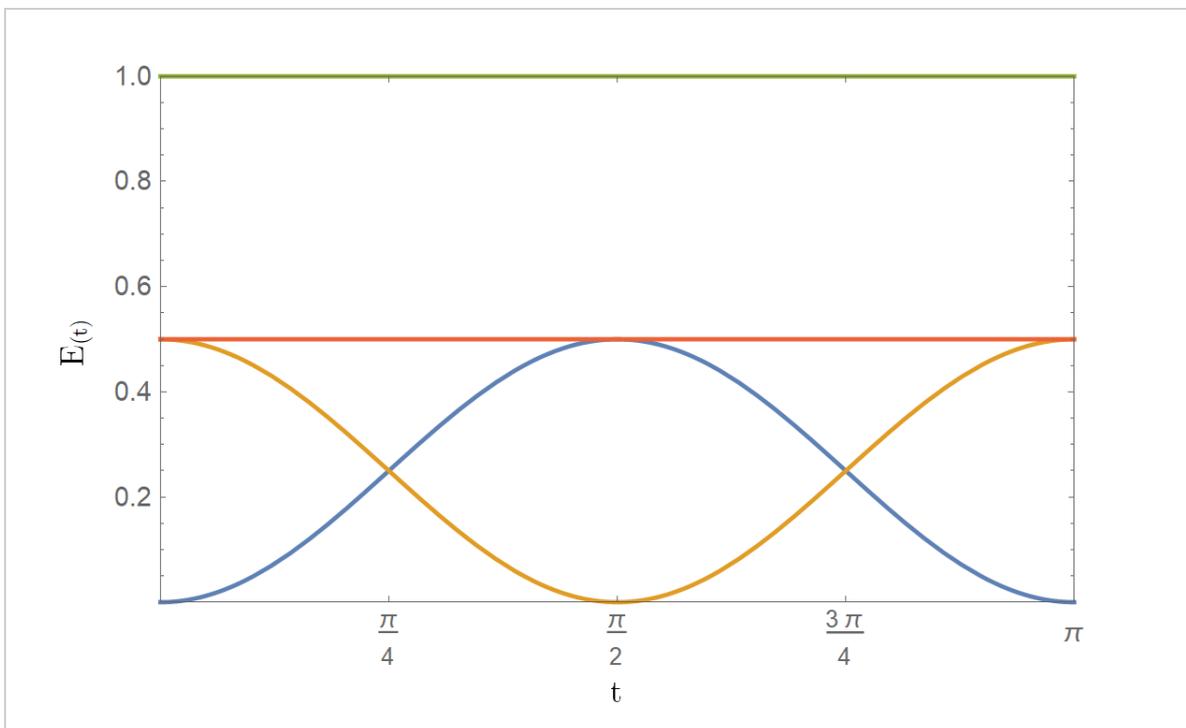


Abbildung 1.3: Hier sind kinetische Energie T (Blau), potentielle Energie U (Orange), Gesamtenergie E_{ges} (Rot) und Amplitude A (Grün) abgebildet. Dabei wurden die Relationen (1.16) vereinfacht indem m , ω und A gleich 1 und φ gleich Null gesetzt wurden, wodurch die Funktionen $T = 1/2 \sin^2(t)$, $U = 1/2 \cos^2(t)$, $E_{ges} = 1/2$ sowie $A = 1$ erhalten werden.

Somit stellt die Gesamtenergie eine Erhaltungsgröße dar, die aus zwei um $\pi/2$ verschobenen oszillierenden Ausdrücken besteht (siehe Abb. 1.3).⁷ Dies lässt sich beim

⁷In Kapitel 1.3 wird die Energieerhaltung mathematisch rigorosier behandelt.

Federpendel vergegenwärtigen: Bei maximaler Auslenkung ist die schwingende Masse kurz unbewegt während die Bewegungsrichtung das Vorzeichen wechselt. Somit hat zu diesem Zeitpunkt die Masse keine kinetische Energie und maximale potentielle Energie. Während sich jedoch die Masse durch die Ruheposition bei $x = 0$ bewegt, verfügt sie über maximale kinetische Energie und keine potentielle.

1.2 Die allgemeine Lösung der klassischen, eindimensionalen harmonischen Schwingung nach Newton

Im vorherigen Kapitel konnten bereits mit relativ unkomplizierten Methoden einige essentielle Grundkonzepte des harmonischen Oszillators beschrieben werden. Für weiterführende Beschreibungen zählt sich jedoch eine mathematisch rigorosere Behandlung des harmonischen Oszillators aus. Dabei wird zunächst der Zusammenhang (1.10) verwendet um (1.3) simpler anzuschreiben:

$$\begin{aligned} m \ddot{x}(t) &= m \omega^2 x(t) \\ \Rightarrow \ddot{x} + \omega^2 x &= 0. \end{aligned} \tag{1.17}$$

Ausgehend davon kann eine allgemeinere Lösung der Differentialgleichung erarbeitet werden. Ein Lösungsansatz, der Sinus- und Cosinusfunktion gleichzeitig berücksichtigt, ist der Exponentialansatz $x(t) = e^{\lambda t}$. Einsetzen in die obige Gleichung ergibt

$$\begin{aligned} (\lambda^2 + \omega^2)e^{\lambda t} &= 0 \\ \Rightarrow \lambda^2 + \omega^2 &= 0. \end{aligned} \tag{1.18}$$

Die Lösung dieser charakteristischen Gleichung ist rein imaginär, da

$$\lambda_{1,2} = \pm i \omega \tag{1.19}$$

gilt. Man erhält somit zwei linear unabhängige Lösungen: $e^{i\omega t}$ und $e^{-i\omega t}$.⁸ Die allgemeine Lösung lautet daher

$$x(t) = c_1 e^{i\omega t} + c_2 e^{-i\omega t}. \tag{1.20}$$

⁸vgl. Embacher (2010), S. 29f.

Eine physikalisch sinnvolle Lösung wird erhalten indem die noch undefinierten Konstanten c_1 und c_2 so gewählt werden, sodass sie die Anfangsbedingungen $x(0) = x_0$ und $\dot{x}(0) = \dot{x}_0$ berücksichtigen. Dies ergibt für die Startposition x_0 und Startgeschwindigkeit \dot{x}_0

$$\begin{aligned}x(0) &= x_0 = c_1 + c_2 \\ \dot{x}(0) &= \dot{x}_0 = i \omega_0(c_1 - c_2).\end{aligned}\tag{1.21}$$

Somit wird für die Konstanten c_1 und c_2

$$\begin{aligned}c_1 &= \frac{1}{2} \left(x_0 - i \frac{\dot{x}_0}{\omega_0} \right) \\ c_2 &= \frac{1}{2} \left(x_0 + i \frac{\dot{x}_0}{\omega_0} \right) = c_1^*\end{aligned}\tag{1.22}$$

erhalten, wobei bereits eine sehr interessante Symmetrie zu beobachten ist: Die Konstanten c_1 und c_2 sind nur eine komplexe Konjugation voneinander entfernt! Man erhält somit eine 'schönere' allgemeine Lösung von (1.3), die auch die 'simplere' Lösung (1.9) enthält⁹:

$$x(t) = \frac{1}{2} \left(x_0 - i \frac{\dot{x}_0}{\omega_0} \right) e^{i\omega_0 t} + \frac{1}{2} \left(x_0 + i \frac{\dot{x}_0}{\omega_0} \right) e^{-i\omega_0 t}.\tag{1.23}$$

Durch Substitution mit $z(t) = \left(x_0 - i \frac{\dot{x}_0}{\omega_0} \right) e^{i\omega_0 t}$ kann diese Lösung auf reelle Zahlen beschränkt werden.¹⁰ Dies ist möglich, da in der klassischen Mechanik die zusätzliche Komplexität noch vermeiden werden kann, die durch imaginäre Zahlen entsteht. Wie in den späteren Kapiteln ersichtlich werden wird, ist das in der quantenmechanischen Beschreibung nicht mehr möglich. Die Substitution ergibt

$$\begin{aligned}x(t) &= z(t) + z^*(t) = 2\text{Re}z(t) \\ &= \text{Re} \left[\left(x_0 - \frac{\dot{x}_0}{\omega_0} \right) (\cos \omega_0 t + i \sin \omega_0 t) \right] \\ &= x_0 \cos \omega_0 t + \frac{\dot{x}_0}{\omega_0} \sin \omega_0 t.\end{aligned}\tag{1.24}$$

⁹Dieses Muster wird sich in den folgenden Kapiteln wiederholen: Alte Lösungen entpuppen sich als Spezialfälle von übergeordneten allgemeineren Lösungen. Das spiegelt die grundlegende Tendenz in der theoretischen Physik wieder, Systeme möglichst allgemein zu beschreiben.

¹⁰vgl. Fließbach (2015), S. 211

Die Lösung lässt sich aber auch anders angeben. Ausgehend von der reellen Form erhält man mit Hilfe des Cosinussatzes

$$\begin{aligned}
 x(t) &= A \cos(\omega_0 t + \varphi) \\
 &= A(\cos \omega_0 t \cos \varphi - \sin \omega_0 t \sin \varphi) \\
 &= A(\cos \varphi) \cos \omega_0 t + (-A \sin \varphi) \sin \omega_0 t.
 \end{aligned} \tag{1.25}$$

Ein Vergleich dieses Ausdrucks mit (1.24) ergibt

$$\begin{aligned}
 x(t) &= A(\cos \varphi) \cos \omega_0 t + (-A \sin \varphi) \sin \omega_0 t \\
 &= x_0 \cos \omega_0 t + \frac{\dot{x}_0}{\omega_0} \sin \omega_0 t. \\
 \Rightarrow x_0 &= A \cos \varphi \quad \text{und} \\
 -\frac{\dot{x}_0}{\omega_0} &= A \sin \varphi.
 \end{aligned} \tag{1.26}$$

Dadurch können der Amplitude A und der Phase φ tiefere physikalische Bedeutungen gegeben werden¹¹:

$$\begin{aligned}
 x_0^2 + \frac{\dot{x}_0^2}{\omega_0^2} &= A^2 \underbrace{(\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi)}_1 \\
 \Rightarrow A &= \sqrt{x_0^2 + \frac{\dot{x}_0^2}{\omega_0^2}} \\
 \Rightarrow \varphi &= \arccos \frac{x_0}{A}.
 \end{aligned} \tag{1.27}$$

Diese Ausdrücke beschreiben eine charakteristische Eigenschaft der harmonischen Schwingung: Amplitude und Phase sind nur von den gewählten Anfangsbedingungen abhängig!¹² Demnach folgt, dass Bewegungen mit beliebig großen Amplituden möglich sind und sie verlaufen *allesamt* mit *gleicher* Frequenz f und Periodendauer τ .

¹¹vgl. Embacher (2010), S. 31

¹²vgl. Embacher (2010), S. 31

1.3 Die harmonische Schwingung in der klassischen Hamiltondynamik

Bisher wurde der harmonische Oszillator anhand klassisch newtonscher Mechanik untersucht, wobei eine wesentlich elegantere Beschreibung über den Hamiltonformalismus erfolgen kann. Die Lösungen der Bewegungsgleichungen (1.9) bzw. (1.23) wurden über eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung (1.3) gewonnen.

Die Formulierung des harmonischen Oszillators in der hamiltonschen Mechanik bietet den entscheidenden Vorteil, dass das gesamte System durch Differentialgleichungen *erster* Ordnung statt zweiter beschrieben werden kann. Abseits davon ist die hamiltonsche Mechanik der Ausgangspunkt für die Betrachtung des *quantenmechanischen* harmonischen Oszillators in Kapitel 2.¹³

Ein eindimensionaler harmonischer Oszillator hat folgende Lagrangefunktion:

$$L = T - U = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - \frac{1}{2} m \omega^2 q^2. \quad (1.28)$$

Daraus kann man den zu q kanonischen konjugierten Impuls p , die Hamiltonfunktion H und ihre kanonischen Gleichungen \dot{q} \dot{p} bestimmen¹⁴:

$$\begin{aligned} p &= \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m \dot{q} \\ \Leftrightarrow \dot{q} &= \frac{p}{m}. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Somit lautet die Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned} H = \dot{q} p - L &= \frac{p^2}{m} - \underbrace{\frac{1}{2} m \dot{q}^2}_{\frac{p^2}{2m}} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2, \end{aligned} \quad (1.30)$$

mit welcher man die *hamiltonischen Gleichungen* erhalten kann¹⁵:

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} = -m \omega^2 q. \end{aligned} \quad (1.31)$$

¹³vgl. Nolting (2014), S. 149

¹⁴vgl. Embacher (2010), S. 148ff.

¹⁵vgl. Fließbach (2015), S. 247

Wird die obere Gleichung ein zweites Mal differenziert und umgeformt, wird erkannt, dass es sich um eine Kraft handelt

$$\dot{p} = F = m \ddot{q}, \quad (1.32)$$

aus welcher mit (1.31) unmittelbar die Bewegungsgleichung des klassischen, eindimensionalen harmonischen Oszillators folgt (vgl. (1.3)):

$$\ddot{q} + \omega^2 q = 0. \quad (1.33)$$

Da $\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \Leftrightarrow H = E_{ges} = const$ gilt, folgt, dass die Energie in diesem System erhalten bleibt.^{16 17 18} Dies überrascht nicht, da einerseits die Kraft des Systems eine konservative ist und andererseits kinetische Energie T und potentielle Energie U exakt gegenphasig schwingen (vgl. (1.16)).

1.3.1 Der mehrdimensionale harmonische Oszillator

Im Hamiltonformalismus, lässt sich auch ein n -dimensionaler harmonischer Oszillator formulieren. Dies ist im Grunde genommen nur eine allgemeinere Form von (1.30), für welche schlicht $n = 1$ angenommen wurde. Für beliebig viele Dimensionen lautet die Hamiltonfunktion daher

$$\begin{aligned} H &= \sum_{i=1}^n \dot{q}_i \dot{p}_i - L \\ &= \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^n p_i^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \sum_{i=1}^n q_i^2. \end{aligned} \quad (1.34)$$

Da sich das Potential $U(q_i) = \frac{1}{2} m \omega^2 \sum_{i=1}^n q_i^2$ aus additiven Termen zusammensetzt, die jeweils nur von einer Dimension abhängen, können die einzelnen Dimensionen

¹⁶Dies ist eine ganz allgemeine Tatsache: In Systemen, deren Energie keine explizite Zeitabhängigkeit aufweist, bleibt die Energie erhalten. Eine fehlende explizite Zeitabhängigkeit ist mit $\partial H / \partial t = 0$ äquivalent. Mathematisch wurde der Zusammenhang zwischen *Erhaltungsgrößen* und *Symmetrien* von der deutschen Mathematikerin Emmy Noether formuliert und ist als *Noether-Theorem* bekannt.

¹⁷vgl. Embacher (2010), S. 119ff.

¹⁸vgl. Nolting (2014), S. 117

separat betrachtet werden. Das bedeutet, dass die resultierenden Bewegungsgleichungen dimensional entkoppelt sind und sich somit für jede der n Dimensionen die eindimensionale harmonische Oszillatorgleichung in der Form (1.30) ergibt.

Komplexere Systeme, bei welchen die Dimensionen gekoppelt oder gar mehrere harmonische Oszillatoren miteinander gekoppelt sind, finden auch Anwendung in der theoretischen Physik: z. B. bei den *Phononen* der Festkörperphysik.¹⁹ Dies wird ausführlicher in Kapitel 4.2 behandelt.

¹⁹vgl. Fließbach (2015), S. 233

2 Der harmonische Oszillator in der Quantenmechanik

2.1 Vom klassischen zum quantenmechanischen harmonischen Oszillator

Als Einstieg in die Thematik des quantenmechanischen harmonischen Oszillators wird, ähnlich wie in Kapitel 1.1, zunächst versucht eine heuristisch nachvollziehbare Beschreibung zu präsentieren bevor genauere Betrachtungen folgen. Ausgangspunkt hierfür stellt das oftmals in der Quantenmechanik angewendete *Korrespondenzprinzip* dar.²⁰ Dabei werden u. A. klassische Variablen, wie etwa Ort x und Impuls p , durch quantenmechanische *Operatoren* ersetzt.

In der klassischen Mechanik wird der eindimensionale harmonische Oszillator als Teilchen mit der Masse m beschrieben, welches durch die Federkonstante k_F am Ort $x = 0$ gebunden ist (vgl. (1.3)). Das dazugehörige Potential lautet

$$V(x) = \frac{1}{2} k_F x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (2.1)$$

Die Gesamtenergie des harmonischen Oszillators lautet daher

$$E_{ges} = T + U = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (2.2)$$

Die Bewegungsgleichung

$$m \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + k x = 0 \quad (2.3)$$

hat die Lösung

$$x(t) = A \sin(\omega t + \varphi). \quad (2.4)$$

Durch eine zeitliche Ableitung der Funktion $x(t)$ kann die Geschwindigkeit $\dot{x}(t)$ erhalten werden. Diese kann nun mit der Masse m multipliziert werden, sodass sich ein Ausdruck für den Impuls gemäß $p(t) = m\dot{x}(t)$ ergibt. Somit lautet der Impuls

$$p(t) = -m \omega A \sin(\omega t + \varphi). \quad (2.5)$$

²⁰vgl. Nolting (2014), S. 148f.

Die Amplitude lässt sich als

$$A = \sqrt{x^2 + \frac{p^2}{m^2\omega^2}} \quad \text{oder} \quad A = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E_{ges}}{m}} \quad (2.6)$$

anschreiben (vgl. (1.27) und (1.15)).

Wie bei der klassischen Beschreibung des harmonischen Oszillators in den vorherigen Kapiteln wird das Verhalten von einem Teilchen im Potential

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (2.7)$$

beschrieben.

Die klassische Hamiltonfunktion lautet demnach (vgl. (1.30))

$$H(p, x) = T + U = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad (2.8)$$

wobei m die Masse bzw. ω die Frequenz bezeichnet. Die Transformation der klassischen Hamiltonfunktion in ihr quantenmechanisches Pendant erfolgt, wie üblich in der elementaren Quantenmechanik, über das Austauschen der klassischen Variablen (hier der Impuls p) mit den entsprechenden quantenmechanischen *Differenzialoperatoren* (hier \hat{p}):

$$p \rightarrow \hat{p} = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (2.9)$$

Somit kann die zuvor klassische Hamiltonfunktion als quantenmechanischer *Hamiltonoperator* beschrieben werden²¹:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m \omega^2 x^2}{2}. \quad (2.10)$$

Die stationäre Schrödingergleichung dazu lautet daher

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad (2.11)$$

aus welcher unmittelbar durch Einsetzen die Eigenwertgleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m \omega^2 x^2}{2} \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (2.12)$$

²¹vgl. Lichtenegger (2015), S. 148

erhalten wird.²²

Spätestens ab diesem Zeitpunkt wird das Konzept der Feder und der phänomenologischen Federkonstante k_F , welche in Kapitel 1.1 Ausgangspunkt der Beschreibung des harmonischen Oszillators darstellt, obsolet. Sie wird daher nicht mehr vorkommen. Sollte sie jedoch überraschenderweise vermisst werden, kann sie jederzeit mit der Relation (1.10) wieder zum Vorschein gebracht werden.

Ebenso wie bei anderen quantenmechanischen Berechnungen muss die Wellenfunktion $\psi(x)$ der Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (2.13)$$

genügen. Diese besagt im Grunde nichts anderes, als dass das Teilchen *irgendwo* vorkommen muss – auch wenn nicht deterministisch vorausgesagt werden kann *wo genau*.

Zur Schrödingergleichung (2.12) gibt es zwei konkrete Lösungsverfahren, welche in den folgenden Kapiteln beschrieben werden. Das erstere erfolgt auf algebraischem Wege in der Dirac-Notation und das zweite gemäß den Gesetzmäßigkeiten für Differentialgleichungen.

2.2 Lösung der Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators auf dem algebraischen Weg

Da u. A. das Potential (2.7) nicht zeitabhängig ist, kann zwecks Vereinfachung²³ die zeitunabhängige (d. h. stationäre) Schrödingergleichung $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$ mit $\hat{H} = \left(-\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}\right)$ verwendet werden. Genauer gesagt ist es in diesem Falle

²²vgl. Straumann (2013), S. 33

²³Ganz allgemein lautet die Schrödingergleichung $i\hbar \frac{d}{dt} \psi(x, t) = \hat{H}\psi(x, t)$ und beschreibt ein zeitlich evolvierendes System. Wenn in \hat{H} keine explizite zeitliche Abhängigkeit besteht, kann die Schrödingergleichung in eine zeitunabhängige Schrödingergleichung und einem Ausdruck für die Zeitentwicklung aufgespalten werden: $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$ und $e^{-i/\hbar Et}$.

möglich die Schrödingergleichung nur mit der Ortsvariable x zu lösen, da in dem Hamiltonoperator \hat{H} keine *explizite* zeitliche Abhängigkeit besteht (d. h. es kommt kein t selbst vor) sondern nur eine *implizite*, wie z. B. in Ort $x(t)$ oder Impuls $p(t)$ (d. h. t kommt nur in Funktionen im Hamiltonoperator vor).²⁴

Daher lautet im eindimensionalen Falle die stationäre Schrödingergleichung konkret in der Ortsdarstellung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (2.14)$$

Grundsätzlich kann diese Differentialgleichung mit einem Potenzreihenansatz gelöst werden, was in Kapitel 2.3 beschrieben wird. Zunächst wird jedoch ein gängigeres und simpleres Lösungsverfahren beschrieben. Bei diesem werden zwei neue Operatoren eingeführt: der Erzeugungsoperator \hat{a}^\dagger und der Vernichtungsoperator²⁵ \hat{a} , mit welchen (2.14) umformuliert werden kann.

Erzeugungs- und Vernichtungsoperator können durch unterschiedlichste Ansätze hergeleitet werden. Bei dem hier präsentierten Ansatz wird (2.14) zunächst mit der Substitution

$$\hat{x} = \hat{q} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{q} = \hat{x} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (2.15)$$

entdimensionalisiert, sodass die Schrödingergleichung nun die Form

$$\frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2\right) \psi(q) = E\psi(q) \quad (2.16)$$

annimmt.²⁶ Der Inhalt der Klammer kann auch als

$$-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 = \left(-\frac{d}{dq} + q\right) \left(\frac{d}{dq} + q\right) + \frac{d}{dq}q - q\frac{d}{dq} \quad (2.17)$$

angeschrieben werden, wobei die letzten zwei Terme mit dem gängigen Zusammenhang $\frac{d}{dq}q - q\frac{d}{dq} = 1$ vereinfacht werden können. Daher gilt

$$-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 = \left(-\frac{d}{dq} + q\right) \left(\frac{d}{dq} + q\right) + 1, \quad (2.18)$$

²⁴vgl. Nolting (2009), S. 303

²⁵Diese werden auch als Leiteroperatoren bezeichnet.

²⁶vgl. Glimm et al. (1981), S. 12

wodurch die Schrödingergleichung (2.16) in die Form

$$\hbar\omega \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{dq} + q \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{dq} + q \right) + \frac{1}{2} \right] \psi(q) = E\psi(q) \quad (2.19)$$

gebracht werden kann. Nun kann der Erzeugungsoperator \hat{a}^\dagger als

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{dq} + q \right) \quad (2.20)$$

bzw. der Vernichtungsoperator \hat{a} als

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{dq} + q \right) \quad (2.21)$$

ausgedrückt werden, wodurch sich (2.19) noch weiter vereinfachen lässt:

$$\hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \psi(q) = E\psi(q). \quad (2.22)$$

Wird nun als weitere Substitution der Impulsoperator \hat{p} mit

$$\hat{s} = \hat{p} \frac{1}{\sqrt{m \omega \hbar}} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{p} = \hat{s} \sqrt{m \omega \hbar} \quad (2.23)$$

entdimensionalisiert und $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ eingesetzt, so erhält man den dimensionslosen Impulsoperator

$$\hat{s} = -i \frac{d}{dx}. \quad (2.24)$$

Mit diesem folgt eine Vielzahl an interessanten Relationen. Es kann sofort gesehen werden wie \hat{q} und \hat{s} kommutieren:

$$[\hat{q}, \hat{s}] = i. \quad (2.25)$$

Damit können \hat{a}^\dagger und \hat{a} nun wie folgt ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q - \frac{d}{dq} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{q} - i \hat{s}) \\ \hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q + \frac{d}{dq} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{q} + i \hat{s}). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Da diese beiden Operatoren nicht hermitesch sind, gilt $\hat{a}^\dagger \neq \hat{a}$.²⁷ Das heißt auch, dass sie keiner Observable entsprechen und somit auch nicht gemessen werden können.

²⁷vgl. Lichtenegger (2015), S. 149

Nun ist es interessant das Kommutationsverhalten der Leiteroperatoren zu untersuchen. Es kann rasch gefunden werden, dass

$$\begin{aligned}
[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \frac{1}{2} [\hat{q} + i\hat{s}, \hat{q} - i\hat{s}] \\
&= \frac{1}{2} ([\hat{q}, -i\hat{s}] + [i\hat{s}, \hat{q}]) \\
&= \frac{-i}{2} ([\hat{q}, \hat{s}] + [\hat{q}, \hat{s}]) \\
&= 1
\end{aligned} \tag{2.27}$$

gilt. Somit werden folgende Kommutatoren erkannt²⁸, welche – wie später noch ersichtlich werden wird – von essentieller Bedeutung sind:

$$\begin{aligned}
[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= 1 \\
[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] &= -1 \\
[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] &= 0 \\
[\hat{a}, \hat{a}] &= 0.
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Die Kommutatoren von \hat{a}^\dagger bzw. \hat{a} und dem Hamiltonoperator (vgl. (2.22))

$$\hat{H} = \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega \left(\hat{a} \hat{a}^\dagger - \frac{1}{2} \right) \tag{2.29}$$

lauten wie folgt:

$$\begin{aligned}
[\hat{H}, \hat{a}] &= [\hbar \omega \left(\hat{a} \hat{a}^\dagger - \frac{1}{2} \right), \hat{a}^\dagger] \\
&= \hbar \omega [\hat{a} \hat{a}^\dagger, \hat{a}] \\
&= -\hbar \omega \hat{a} \\
[\hat{H}, \hat{a}^\dagger] &= \hbar \omega \hat{a}^\dagger.
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Diese Kommutatoren gelten selbstverständlich auch wenn von den dimensionslosen \hat{q} und \hat{s} auf \hat{x} und \hat{p} rücksubstituiert wird! Ausgedrückt mit \hat{x} und \hat{p} lauten \hat{a}^\dagger bzw. \hat{a} wie folgt (vgl. (2.15), (2.23) und (2.26))²⁹:

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} (q - is) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{x} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} \hat{p} \right) \\
\hat{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (q + is) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{x} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} + i \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} \hat{p} \right).
\end{aligned} \tag{2.31}$$

²⁸vgl. Nolting (2009), S. 303

²⁹vgl. Nolting (2009), S. 304

Damit können Orts- und Impulsoperator auch über \hat{a}^\dagger und \hat{a} ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned}\hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{p} &= \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} i(\hat{a}^\dagger - \hat{a}).\end{aligned}\tag{2.32}$$

Unter der Annahme, dass ψ_n ein Eigenzustand des Hamiltonoperators der Schrödingergleichung $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$ ist, kann untersucht werden wie sich die Kommutatoren (2.30) auf ψ_n auswirken:

$$\begin{aligned}[\hat{H}, \hat{a}] \psi_n &= -\hbar\omega \hat{a} \psi_n \\ \hat{H} \hat{a} \psi_n - \hat{a} \hat{H} \psi_n &= -\hbar\omega \hat{a} \psi_n \\ \hat{H} (\hat{a} \psi_n) - E_n (\hat{a} \psi_n) &= -\hbar\omega \hat{a} \psi_n \\ \Rightarrow \hat{H} (\hat{a} \psi_n) &= (E_n - \hbar\omega) (\hat{a} \psi_n)\end{aligned}\tag{2.33}$$

Diese Gleichung zeigt, dass $\hat{a} \psi_n$ eine Eigenfunktion von \hat{H} mit dem Eigenwert $E_n - \hbar\omega$ ist. Physikalisch betrachtet bedeutet dies, dass der Vernichtungsoperator \hat{a} die Energie des Oszillators um *genau* $\hbar\omega$ senkt!

Eine ähnliche Rechnung zeigt, wie sich $[\hat{H}, \hat{a}^\dagger]$ auf ψ_n auswirkt:

$$\begin{aligned}[\hat{H}, \hat{a}^\dagger] \psi_n &= \hbar\omega \hat{a}^\dagger \psi_n \\ \hat{H} \hat{a}^\dagger \psi_n - \hat{a}^\dagger \hat{H} \psi_n &= \hbar\omega \hat{a}^\dagger \psi_n \\ \hat{H} (\hat{a}^\dagger \psi_n) - E_n (\hat{a}^\dagger \psi_n) &= \hbar\omega \hat{a}^\dagger \psi_n \\ \Rightarrow \hat{H} (\hat{a}^\dagger \psi_n) &= (E_n + \hbar\omega) (\hat{a}^\dagger \psi_n)\end{aligned}\tag{2.34}$$

Es ist zu erkennen, dass $\hat{a}^\dagger \psi_n$ auch eine Eigenfunktion von \hat{H} ist. Der Eigenwert ist jedoch $E_n + \hbar\omega$. Somit fungiert der Erzeugungsoperator \hat{a}^\dagger physikalisch anders, da er die Energie um *genau* $\hbar\omega$ hebt!³⁰ Die Energiedifferenz zwischen benachbarten Eigenzuständen ΔE ist somit

$$\Delta E = \hbar\omega.\tag{2.35}$$

³⁰vgl. Nolting (2009), S. 312ff.

Nun stellt sich die Frage was das niedrigste Energieniveau des harmonischen Oszillators überhaupt sein kann. Diese sogenannte *Nullpunktenergie* wird in Kapitel 2.2.2 detaillierter diskutiert. Eine erste Abschätzung des niedrigstmöglichen Energiewerts kann jedoch jetzt schon erfolgen. Hierfür wird festgelegt, dass der Erwartungswert des Hamiltonoperators im Zustand $|\psi\rangle$ zumindest null sein muss:

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \frac{1}{2m} \langle p\psi|p\psi\rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x\psi|x\psi\rangle \geq 0. \quad (2.36)$$

Um diese Bedingung zu erfüllen, wird vorausgesetzt, dass die Anwendung des Vernichtungsoperators auf den Grundzustand ψ_0 Null für die Wellenfunktion ergeben muss:

$$\hat{a} \psi_0 = 0 \quad \text{mit} \quad \psi_0 \neq 0. \quad (2.37)$$

Damit kann das Energieniveau des Grundzustandes – d. h. die Nullpunktenergie – ermittelt werden.³¹ Hierfür kann die obige Annahme auf den Hamiltonoperator in der Form (2.29) angewendet werden:

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_0 &= \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \psi_0 \\ &= \frac{1}{2} \hbar\omega \psi_0. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Somit ergibt sich eine Grundzustandsenergie von $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$. Bei einem klassischen, harmonischen Oszillator ist die Grundzustandsenergie gleich 0. Die obige Rechnung zeigt, dass dies beim quantenmechanischen harmonischen Oszillator unmöglich ist, da sie zumindest $\frac{1}{2} \hbar\omega$ sein muss!

Allgemein können beliebige n -te Energieniveaus von ψ_n wie folgt ausgedrückt werden³²:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{mit} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.39)$$

Es bietet sich an, einen Operator \hat{N} für n einzuführen³³, den *Besetzungszahloperator*,

³¹vgl. Nolting (2009), S. 312

³²vgl. Fließbach (2015), S. 239

³³vgl. Annett (2004), S. 98f.

und den Hamiltonoperator neu auszudrücken:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hbar\omega \left(\underbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a}}_{\hat{N}} + \frac{1}{2} \right) \\ &= \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right).\end{aligned}\tag{2.40}$$

Der Besetzungszahloperator kommutiert mit \hat{a} und \hat{a}^\dagger wie folgt³⁴:

$$\begin{aligned}[\hat{N}, \hat{a}] &= [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} = \underbrace{[\hat{a}^\dagger, \hat{a}]}_{=-1} \hat{a} = -\hat{a} \\ [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] &= \dots = \hat{a}^\dagger.\end{aligned}\tag{2.41}$$

Zudem ergibt sich ein interessanter Zusammenhang zwischen \hat{N} und dem Kommutator $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]$, welcher später noch Anwendung finden wird:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{N} = 1.\tag{2.42}$$

2.2.1 Eigenfunktionen und Eigenenergiewerte angeregter Zustände

Nun soll noch die Eigenfunktion des harmonischen Oszillators in der Form (2.37) betrachtet werden, wobei \hat{a} (vgl. (2.31)) vollständig über \hat{x} ausgedrückt wird:

$$\begin{aligned}\hat{a} \psi_0(x) &= 0 \\ \omega x + \frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} \psi_0(x) &= 0.\end{aligned}\tag{2.43}$$

Dies stellt eine lineare, totale Differentialgleichung dar, welche über die Lösung

$$\psi_0(x) = C e^{-\frac{m \omega x^2}{2\hbar}}\tag{2.44}$$

verfügt, wobei die Konstante C über die Normierungsbedingung (2.13) und der Integralformel

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}\tag{2.45}$$

bestimmt werden kann.³⁵ Man erhält somit

$$C = \left(\frac{m \omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{i\alpha},\tag{2.46}$$

³⁴vgl. Nolting (2009), S. 305

³⁵vgl. Nolting (2009), S. 312f.

wobei die Phase α ohne Beschränkung der Allgemeinheit gleich Null gesetzt werden kann, da sie keine physikalische Größe repräsentiert. Die Wellenfunktion des Grundzustandes des harmonischen Oszillators lautet somit

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}. \quad (2.47)$$

Rein mathematisch betrachtet, ist sofort zu erkennen, dass es sich um eine gaußsche Glockenkurve handelt, welche bekanntlich über die Dichtefunktion $f(x) = 1/\sqrt{2\pi\sigma} e^{-x^2/2\sigma^2}$ verfügt. Die gaußsche Glockenkurve ist grundsätzlich über e^{-x^2} charakterisiert, da der Vorfaktor $1/\sqrt{2\pi\sigma}$ und der Nenner in der Exponentialfunktion $2\sigma^2$ lediglich der Normierung der gesamten Funktion auf 100% dienen.

Ein Vergleich der Wellenfunktion des Grundzustandes (2.47) mit der gaußschen Glockenkurve zeigt, dass nur die Normierungsfaktoren andere sind! Somit hat die Wellenfunktion essentiell die Form einer gaußschen Glockenkurve, wobei ihre Form durch die physikalischen Größen m und ω sowie der Naturkonstante \hbar bestimmt ist. Die Wellenfunktion (2.47) und ihre dazugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte sind auf Abb. 2.1 aufgezeichnet.

Welche Form haben nun höhere angeregte Zustände? Hierfür müssen die Koeffizienten C des Erzeugung- und Vernichtungsoperators betrachtet werden. Aus

$$\hat{a}^\dagger \psi_n = C \psi_{n+1} \quad (2.48)$$

folgt

$$\begin{aligned} |C|^2 &= \langle \hat{a}^\dagger \psi_n | \hat{a}^\dagger \psi_n \rangle \\ &= \langle \hat{a} \hat{a}^\dagger \psi_n | \psi_n \rangle \\ &= \langle (\hat{a}^\dagger \hat{a} + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger]) \psi_n | \psi_n \rangle \\ &= (n+1) \langle \psi_n | \psi_n \rangle \\ &= n+1. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Somit wirkt der Erzeugungsoperator auf eine Wellenfunktion wie folgt:

$$\hat{a}^\dagger \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}. \quad (2.50)$$

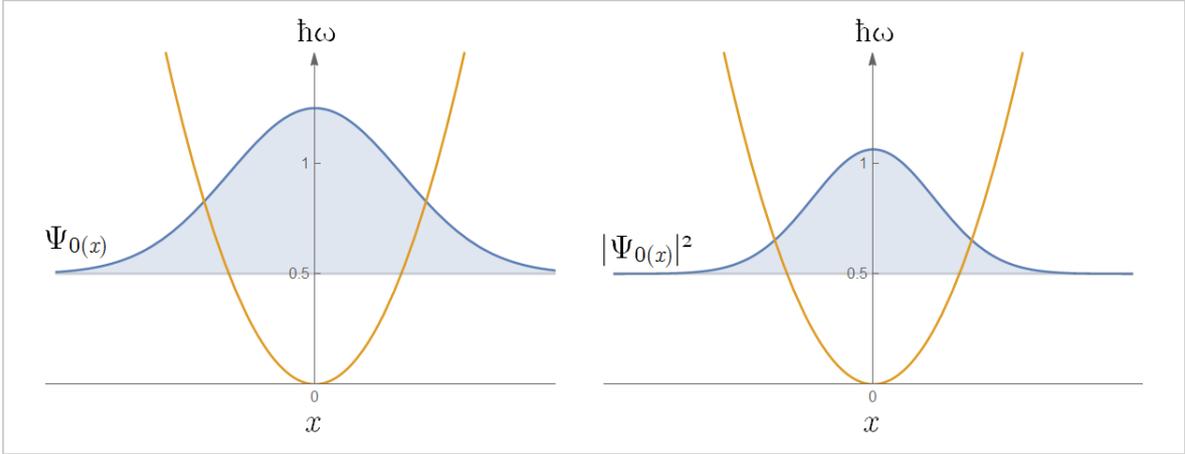


Abbildung 2.1: Aufgezeichnet sind hier Wellenfunktion des Grundzustandes $\psi_0(x)$ (Blau) sowie ihre dazugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_0(x)|^2$, welche – wie üblich in der Quantenmechanik – über die Quadrierung des Betrags der Wellenfunktion erhalten wird. Dabei wurde (2.47) vereinfacht indem m , \hbar und ω gleich 1 gesetzt wurden. Zu beachten ist, dass die Form der Glockenkurve durch m und ω bestimmt wird und dass sie nur oberhalb von $1/2 \hbar\omega$ existiert, da dies gemäß (2.39) die *minimale* Energie des harmonischen Oszillators ist. Ebenso wurde das Potential des harmonischen Oszillators (2.7) (Orange) aufgezeichnet, wodurch gleich ein interessanter Umstand aufgezeigt wird: Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen *außerhalb* des Potentials anzutreffen, ist nicht gleich Null! Klassisch gedacht wäre dies unmöglich.

Eine ähnliche Rechnung liefert für den Vernichtungsoperator

$$\hat{a} \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}. \quad (2.51)$$

Allgemeiner ausgedrückt gilt für beliebige Energieeigenzustände³⁶ ausgehend vom Grundzustand ψ_0

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0. \quad (2.52)$$

Setzt man nun für \hat{a}^\dagger (2.31) und für $\psi_0(x)$ (2.47) ein, so erhält man für die Ortsdarstellung

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \right]^n \psi_0(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \right]^n \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

³⁶vgl. Lichtenegger (2015), S. 149

Damit können sämtliche Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators berechnet werden. Die resultierenden Funktionen sind das Produkt aus den sogenannten *Hermite-Polynomen*³⁷ und der Exponentialfunktion des Grundzustandes ψ_0 . Die Hermite-Polynome sind definiert als

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} = \left(2x - \frac{d}{dx}\right)^n, \quad (2.54)$$

welche der *hermiteschen Differentialgleichung*³⁸

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2x \frac{\partial}{\partial x} + 2n\right) H_n(x) = 0 \quad (2.55)$$

genügen. Einige konkrete Polynome und ihre dazugehörigen Energieeigenwerte sind in Tab. 2.1 dargestellt.

Tabelle 2.1: Die Hermite-Polynome mit assoziierten Energieeigenwerten für n -te Zustände

n	$H_n(x)$	E_n
0	1	$\frac{1}{2}\hbar\omega$
1	$2x$	$\frac{3}{2}\hbar\omega$
2	$4x^2 - 2$	$\frac{5}{2}\hbar\omega$
3	$8x^3 - 12x$	$\frac{7}{2}\hbar\omega$
\vdots	\vdots	\vdots
n	$(-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$	$\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$

Mit den Hermite-Polynomen (2.54) kann (2.53) wie folgt dargestellt werden³⁹:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \underbrace{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}_{\psi_0(x)} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right). \quad (2.56)$$

Mit dieser Funktion können sämtliche diskrete Zustände des harmonischen Oszillators beschrieben werden. Die jeweiligen Wellenfunktionen für konkrete n – also $\psi_0(x)$, $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$, ... – sind um das Potential des harmonischen Oszillators (2.7)

³⁷Benannt nach dem französischen Mathematiker Charles Hermite.

³⁸vgl. Nolting (2009), S. 315

³⁹vgl. Schmüser (2012), S. 38

lokalisiert. Zudem sind benachbarte Zustände durch ihre assoziierten Energieeigenwerte jeweils $\hbar\omega$ voneinander entfernt (vgl. (2.39)). Dies ist auf Abb. 2.2 dargestellt.

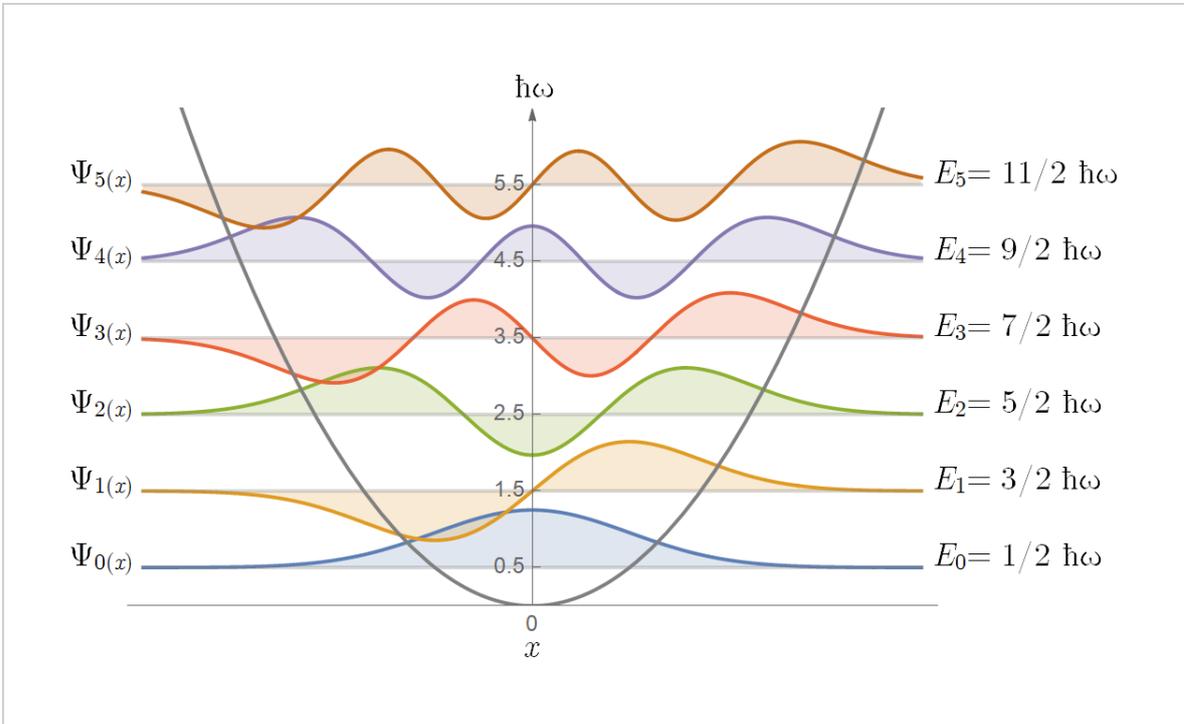


Abbildung 2.2: Abgebildet sind hier die ersten sechs Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators, wobei (2.56) vereinfacht wurde indem m , \hbar und ω gleich 1 gesetzt wurden. Somit wurde die Funktion $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{x^2/2} H_n(x)$ erhalten, woraus sich für $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ die entsprechenden Wellenfunktionen ergeben. Diese sind durch ihre jeweiligen diskreten Energieeigenwerte jeweils um $\hbar\omega$ voneinander entfernt. In Grau ist das Potential (2.7) dargestellt. Werden die höheren Zustände nicht beachtet, ist im Grunde genommen die Wellenfunktion des Grundzustandes, wie auf Abb. 2.1 dargestellt, zu erkennen.

Von Interesse ist auch die Wahrscheinlichkeitsdichte von (2.56). Diese wurde für die ersten sechs Wellenfunktionen auf Abb. 2.3 aufgezeichnet. Auch hier sind benachbarte Zustände jeweils $\hbar\omega$ voneinander entfernt.

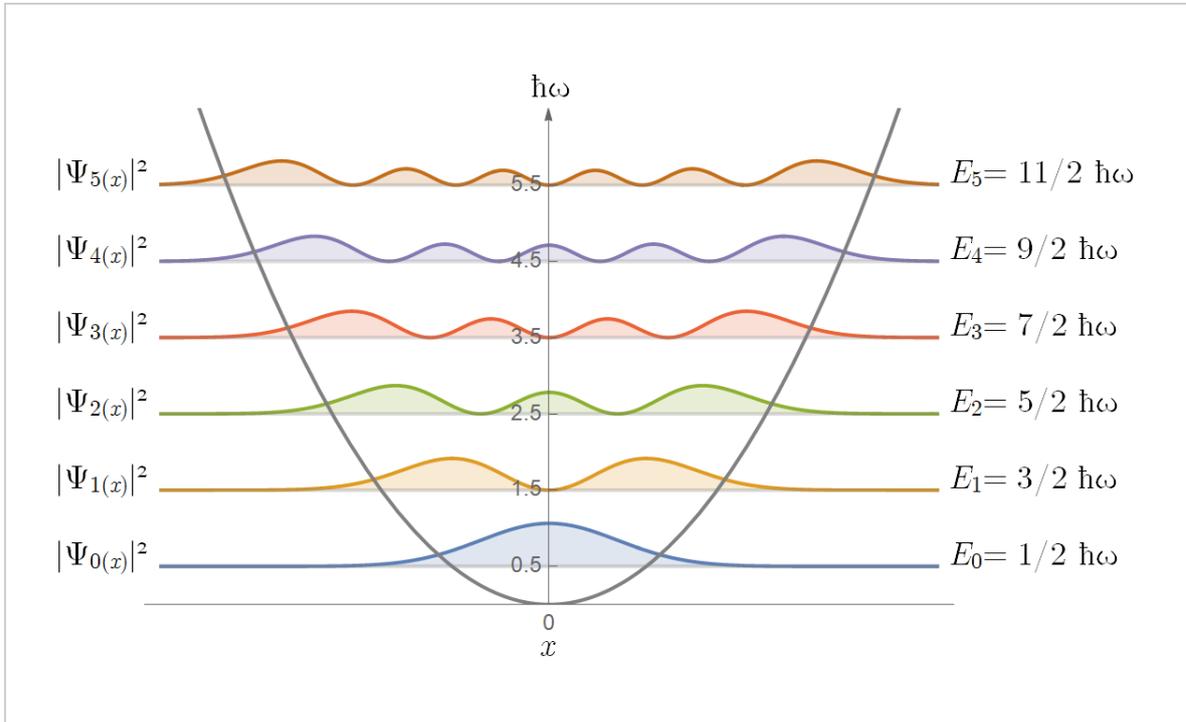


Abbildung 2.3: Zu erkennen sind hier die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der ersten sechs Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators. Wie auch auf Abb. 2.2 wurde (2.56) mit $m = \hbar = \omega = 1$ vereinfacht und für $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ gelöst. Bereits hier ist eine interessante Symmetrie zu erkennen: Die Wahrscheinlichkeitsdichten des n -ten Zustandes haben $n + 1$ lokale Maxima und n Minima, wodurch sich für Zustände mit $n \geq 1$ verbotene Stellen ergeben, an welchen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit gegen Null geht. Klassisch betrachtet wären hingegen jegliche Bereiche innerhalb des Potentials erlaubt.

2.2.2 Die Nullpunktenergie

Im vorherigen Kapitel wurde mit (2.36) ein erster Hinweis über das niedrigstmögliche Energieniveau des harmonischen Oszillators geben. Dieses lässt sich jedoch über einen eleganteren Ansatz als $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq 0$ herleiten. In der klassischen Mechanik ist die kleinste Energie, über die ein harmonischer Oszillator verfügen kann, $E = 0$ – quantenmechanisch jedoch $E = \hbar\omega/2$.

Ausgehend von der heisenbergschen Unschärferelation $\Delta x_\psi \Delta p_\psi \geq \hbar/2$ kann der Erwartungswert des Ortes $\langle x \rangle_\psi$ für die zeitunabhängige Wellenfunktion $\psi(x)$ untersucht werden⁴⁰:

$$\langle x \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx \propto \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \psi(x) dx = 0. \quad (2.57)$$

Daraus ergibt sich mit (2.42) für die Ortsunschärfe Δx

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} \\ &= \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx} \\ &= \sqrt{\frac{x_0^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) (\hat{a}^2 + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2}) \psi(x) dx} \\ &= \sqrt{\frac{x_0^2}{2} (0 + (n+1) + n + 0)} \\ &= x_0 \sqrt{n + \frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Analog wird für die Impulsunschärfe Δp

$$\Delta p = \frac{\hbar}{x_0} \sqrt{n + \frac{1}{2}} \quad (2.59)$$

erhalten.

Da für den Grundzustand $\langle x \rangle_\psi = \langle p \rangle_\psi = 0$ gilt, kann aus der heisenbergschen Unschärferelation $\Delta x_\psi \Delta p_\psi \geq \hbar/2$

$$\langle x^2 \rangle_\psi \langle p^2 \rangle_\psi \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.60)$$

⁴⁰vgl. Schmüser (2012), S. 35

hergeleitet werden. Damit kann für die Energie die Ungleichung

$$E = \langle H \rangle_\psi = \frac{\langle p^2 \rangle_\psi}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \underbrace{\langle x^2 \rangle_\psi}_{\geq \frac{\hbar^2}{4\langle p^2 \rangle_\psi}} \quad (2.61)$$

erhalten werden. Indem die Ableitung nach $\langle p^2 \rangle$ gleich Null gesetzt wird, kann das Minimum $\langle p^2 \rangle_{min}$ bestimmt werden:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{\hbar^2}{4(\langle p^2 \rangle_{min})^2} &= 0 \\ \Rightarrow \langle p^2 \rangle_{min} &= \frac{m \hbar \omega}{2}. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Somit folgt für die kleinstmögliche Energie des harmonischen Oszillators

$$E \geq \frac{\hbar \omega}{2}. \quad (2.63)$$

Dadurch kann die Nullpunktenergie als eine direkte Konsequenz der Unschärferelation aufgefasst werden. Anders ausgedrückt: Die Nullpunktenergie ist die kleinstmögliche Energie, die mit der Unschärferelation vereinbar ist.⁴¹

2.3 Lösung der Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators als Differentialgleichung

Wie in Kapitel 2.1 bereits erwähnt, ist die Lösung der Schrödingergleichung mit Hilfe der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren nur eine von zwei hier präsentierten Lösungsverfahren. Obwohl ersteres gängiger ist, kann die Eigenwertgleichung (vgl. (2.14))

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m \omega^2 x^2}{2} \right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.64)$$

auch über einen Potenzreihenansatz nach Sommerfeld gelöst werden⁴². Dazu werden zunächst drei neue Variablen eingeführt

$$\begin{aligned} x_0^2 &= \frac{\hbar}{m \omega} \\ z &= \frac{x}{x_0} \\ \lambda &= \frac{2E}{\hbar \omega}, \end{aligned} \quad (2.65)$$

⁴¹vgl. Nolting (2009), S. 309f.

⁴²vgl. Nolting (2009), S. 315ff.

mit welchen sich die Schrödingergleichung zu

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2 + \lambda\right) \psi(z) = 0 \quad (2.66)$$

umformen lässt. Für sehr große z kann λ vernachlässigt werden, wodurch sich die Differentialgleichung auf

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2\right) \psi(z) = 0 \quad (2.67)$$

reduziert und sich mit dem Ansatz

$$\psi(z) = a e^{-z^2/2} \quad (2.68)$$

näherungsweise lösen lässt. Dies lässt sich leicht zeigen:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - z^2\right) a e^{-z^2/2} = ((z^2 - 1) - z^2) e^{-z^2/2} = -e^{-z^2/2} \rightarrow 0 \quad \text{für } z \rightarrow \infty. \quad (2.69)$$

Daher kann

$$\psi(z) = A(z) e^{-z^2/2} \quad (2.70)$$

als Ansatz gewählt werden. Einsetzen von diesem in (2.66) liefert

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2z \frac{\partial}{\partial z} + \lambda - 1\right) \psi(z) = 0. \quad (2.71)$$

Damit wurde (2.70) in eine Form gebracht, die mit einer Potenzreihe gelöst werden kann. Dazu wird die noch nicht definierte Funktion $A(z)$ aus (2.70) mit folgender Potenzreihe gleichgesetzt:

$$A(z) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i z^i. \quad (2.72)$$

Wird nun diese Reihe in (2.71) eingesetzt, so wird

$$\sum_{i=0}^{\infty} a_i [i(i-1) z^{i-2} - 2i z^i + (\lambda-1) z^i] = 0 \quad (2.73)$$

erhalten. Nun muss die Summe verschwinden. Dies kann erreicht werden, indem die Koeffizienten der Potenzen verschwinden, was mit der Bedingung

$$(i+2)(i+1) a_{i+1} - (2i+1-\lambda) a_i = 0 \quad (2.74)$$

erzielt werden kann. Nachdem damit die Koeffizienten der Potenzen entfernt wurden, ergibt sich für die Koeffizienten eine Rekursionsrelation, mit einem vorteilhaften Grenzverhalten für große i :

$$a_{i+2} = \frac{(2i+1-\lambda)}{(i+2)(i+1)} a_i \quad \xrightarrow{i \rightarrow \infty} \quad \frac{a_{i+2}}{a_i} = \frac{2}{i}. \quad (2.75)$$

Dieses Grenzverhalten von $A(z)$ wird nun mit einer neuen Potenzreihe $e^{z^2} = \sum (z^2)^i / i!$ verglichen, um zu gewährleisten, dass das Verhalten der Exponentialfunktion nicht zerstört wurde.⁴³ Der Vergleich für die geraden Indizes liefert

$$e^{z^2} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(z^2)^i}{i!} = \sum_j^{0,2,4,\dots} b_j z^j$$

mit $b_j = \frac{1}{\frac{j!}{2!}}$ (2.76)

und $\frac{b_{j+2}}{b_j} = \frac{\frac{j!}{2!}}{\frac{(j+2)!}{2!}} = \frac{1}{\frac{j}{2} + 1} \xrightarrow{j \rightarrow \infty} \frac{2}{j}$.

Damit lässt sich erkennen, dass die Reihe $A(z)$ wie e^{z^2} für große z divergieren würde – vorausgesetzt sie bricht nicht ab. Daher würde $\psi(z)$ wie $e^{z^2} e^{-z^2/2} = e^{z^2/2}$ bei großen z divergieren und $\psi(x)$ wäre nicht normierbar. Anders ausgedrückt: Es ist physikalisch zulässig, dass die Reihe abbricht!

Jetzt muss jedoch noch bestimmt werden *wie* ein Abbrechen der Reihe erreicht werden kann. Gemäß (2.75) wurden an die Konstante λ sehr spezielle Bedingungen gestellt: Eine physikalisch sinnvolle Lösung ergibt sich immer dann, wenn für endliche i mit $i = 0, 1, 2, \dots$

$$\lambda = 2i + 1 \quad (2.77)$$

gilt. Da $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$, wird unmittelbar eine bereits bekannte Energierelation erkannt:

$$E_i = \hbar\omega \left(i + \frac{1}{2} \right). \quad (2.78)$$

⁴³Diese ist schließlich auch noch Teil des Lösungsansatzes (2.70)!

Die zu den Energieeigenwerten E_i gehörigen Eigenfunktionen $A(z)$ könnten theoretisch mit der Rekursionsrelation (2.75) bestimmt werden, womit die Wellenfunktionen $\psi_n(x)$ erhalten werden würden. Dies kann beispielsweise für die erste Eigenfunktion mit $n = 0$ gezeigt werden:

$$\begin{aligned} n = 0 &\Rightarrow a_0 \neq 0, a_2 = a_4 = \dots = 0, \\ \psi_0(z) &= a_0 e^{-z^2/2} \\ \Rightarrow \psi_0(x) &= a_0 e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}. \end{aligned} \tag{2.79}$$

Die Konstante a_0 ergibt sich über die Normierungsbedingung für $\psi(x)$. Aber auch ohne die explizite Lösung von a_0 ist bereits die Ähnlichkeit mit der Wellenfunktion des Grundzustands (2.47) deutlich erkennbar!

Es kann jedoch auch $\lambda = 2n + 1$ in (2.66) eingesetzt werden um die Differentialgleichung

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2z \frac{\partial}{\partial z} + 2n \right) A(z) = 0 \tag{2.80}$$

zu erhalten, welche mit der Differentialgleichung der Hermite-Polynome (2.55) übereinstimmt! Somit kann mit $z = x/x_0$ (siehe (2.65) und (2.70)) die Wellenfunktion des harmonischen Oszillators wie folgt ausgedrückt werden:

$$\psi_n(x) = a A(x/x_0) e^{(x/x_0)^2/2} = a H_n(x/x_0) e^{(-x/x_0)^2/2}. \tag{2.81}$$

Nun bleibt noch die Frage offen welche Form die Normierungskonstante a hat. Diese kann mit der Orthogonalitätsrelation der Hermite-Polynome⁴⁴

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm} \tag{2.82}$$

⁴⁴vgl. Straumann (2013), S. 36f.

bestimmt werden:

$$\begin{aligned}
1 &\stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx \\
&= a^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(x/x_0) e^{-(x/x_0)^2/2} dx \\
&= a^2 x_0 \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(z) e^{-z^2} dz \\
&= a^2 x_0 \sqrt{\pi} 2^n n! \\
\Rightarrow a &= \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n! x_0}.
\end{aligned} \tag{2.83}$$

Eingesetzt in (2.81) ergibt sich mit (2.65) für die Wellenfunktion

$$\begin{aligned}
\psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n! x_0} H_n(x/x_0) e^{-(x/x_0)^2/2} \\
\Leftrightarrow \psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \underbrace{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}_{\psi_0(x)},
\end{aligned} \tag{2.84}$$

was exakt mit (2.56) übereinstimmt! Die in diesem Kapitel dargestellte Methode, die Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators durch einen Polynomansatz zu lösen, wurde vom deutschen Physiker Arnold Sommerfeld entwickelt.⁴⁵

2.4 Es wird Zeit für t : Kohärente und quasi-klassische Zustände

Im vorherigen Kapitel wurde die quantenmechanische Behandlung des harmonischen Oszillators ausführlich diskutiert. Es ist bekannt, dass quantenmechanische Systeme über klassische Grenzfälle verfügen. Diese ergeben sich üblicherweise für große Teilchenzahlen ($n \rightarrow \infty$) oder durch das Nullsetzen des planckschen Wirkungsquantums ($\hbar = 0$). Quasi-klassische Zustände können jedoch auch über andere Überlegungen erreicht werden. In diesem Kapitel werden sogenannte *kohärente Zustände* beschrieben, die eine beinahe klassische Interpretation des quantenmechanischen harmonischen Oszillators ermöglichen.

Wie bereits gezeigt, gilt für stationäre Lösungen von $\psi_n(x)$ gemäß (2.57) $\langle x \rangle_{\psi_n} = 0$, was bedeutet, dass in diesem Zustand offensichtlich keine Bewegung und somit auch keine Oszillation stattfindet. Nun wäre es jedoch interessant Lösungen der

⁴⁵vgl. Nolting (2009), S. 319

Schrödingergleichung zu finden, bei welchen der Ortserwartungswert wie in der klassischen Beschreibung eine periodische Schwingung ausführt.

Dazu müssen die Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung untersucht werden. Ausgangspunkt hierfür stellen die Eigenzustände $\psi_\alpha(x)$ des Vernichtungsoperators \hat{a} dar:

$$\hat{a} \psi_\alpha(x) = \alpha \psi_\alpha(x) \quad \text{mit} \quad \alpha \in \mathbb{C}. \quad (2.85)$$

Die Zustände $\psi_\alpha(x)$ werden über die Fourier-Reihe nach den stationären Zuständen $\psi_n(x)$ entwickelt:

$$\psi_\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x). \quad (2.86)$$

Nun müssen die Entwicklungskoeffizienten c_n untersucht werden. Da die Eigenfunktionen $\psi_n(x, t)$ eines beliebigen hermiteschen Operators ein orthogonales Funktionensystem bilden, erfüllen diese auch die Vollständigkeitsrelation⁴⁶

$$\sum_n \psi_n^*(x', t) \psi_n(x, t) = \delta(x - x'). \quad (2.87)$$

Für die Eigenfunktionen $\psi_n(x, t)$ gilt somit

$$\begin{aligned} \psi_n(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \psi(x', t) dx' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_n \psi_n^*(x', t) \psi_n^*(x, t) \psi(x', t) dx' \\ &= \sum_n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x', t) \psi(x', t) dx'}_{\equiv c_n} \psi_n(x, t), \end{aligned} \quad (2.88)$$

wobei die anfallenden Integrale als die Entwicklungskoeffizienten c_n definiert werden. Somit folgt für diese mit (2.52) folgendes, wobei ausgenutzt wird das \hat{a} der adjungierte Operator von \hat{a}^\dagger ist:

$$\begin{aligned} c_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \psi_\alpha(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0(x) \psi_\alpha(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \psi_0(x) \hat{a}^n \psi_\alpha(x) dx \\ &= \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x) \psi_\alpha(x) dx. \end{aligned} \quad (2.89)$$

⁴⁶vgl. Fließbach et al. (2012), S. 441

Dabei wird eine Konstante C für das Integral $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0(x) \psi_\alpha(x) dx$ eingeführt. Somit können nun die Zustände $\psi_\alpha(x)$ ohne die Entwicklungskoeffizienten c_n ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned}\psi_\alpha(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) \\ &= C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x).\end{aligned}\tag{2.90}$$

Die Konstante C ist über die Normierungsbedingung leicht zu bestimmen⁴⁷:

$$\begin{aligned}1 &\stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\alpha^*(x) \psi_\alpha(x) dx \\ &= C^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \\ &= C^2 e^{|\alpha|^2} \\ \Rightarrow C &= e^{-|\alpha|^2/2}.\end{aligned}\tag{2.91}$$

Somit folgt für $\psi_\alpha(x)$

$$\begin{aligned}\psi_\alpha(x) &= C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x) \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x).\end{aligned}\tag{2.92}$$

Die zeitabhängigen Zustände $\psi_\alpha(x, t)$ können nun über eine neu ausgedrückte Zeitentwicklung der stationären Zustände $\psi_\alpha(x)$ erhalten werden⁴⁸:

$$\begin{aligned}\psi_\alpha(x, t) &= \psi_\alpha(x) e^{-iE_n t/\hbar} \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}.\end{aligned}\tag{2.93}$$

Die Energie kann natürlich mit $E_n = \hbar \omega (n + 1/2)$ anders ausgedrückt werden, sodass

$$\psi_\alpha(x, t) = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t/2})^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x) e^{-i\omega t/2}\tag{2.94}$$

⁴⁷vgl. Fließbach et al. (2012), S. 439

⁴⁸vgl. Fließbach et al. (2012), S. 440f.

gilt! Diese Zustände $\psi_\alpha(x, t)$ sind die sogenannten *kohärenten Zustände* und stellen Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung dar. Kohärent beschreibt in diesem Zusammenhang ein System, dessen Grundzustand eine Auslenkung vom Ursprung des Systems erlaubt.⁴⁹ Sie stellen eine Verbindung zur klassischen Physik dar, da beispielsweise in der klassischen Elektrodynamik elektromagnetische Wellen kohärenten Zuständen ähnlich sind.⁵⁰

Dieses Verhalten lässt sich verdeutlichen indem der Erwartungswert des Ortes $\langle x \rangle$ betrachtet wird:

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle_{\psi_\alpha} &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\alpha^*(x, t) x \psi_\alpha(x, t) dx \\
 &= \frac{x_0}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_\alpha^*(x, t) (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \psi_\alpha(x, t) dx \\
 &= \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\alpha e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t}) \\
 &\stackrel{\alpha = |\alpha| e^{i\delta}}{=} \frac{x_0}{\sqrt{2}} |\alpha| (e^{-i(\omega t - \delta)} + e^{i(\omega t - \delta)}) \\
 &= \sqrt{2} x_0 |\alpha| \cos(\omega t - \delta).
 \end{aligned} \tag{2.95}$$

Zu erkennen ist, dass der Ortserwartungswert periodisch mit t schwingt, was bei dem stationären Ortserwartungswert (2.57) nicht der Fall ist. Demnach stellen die kohärenten Zustände jene Zustände dar, bei denen – ähnlich wie in der klassischen Beschreibung des harmonischen Oszillators – der Ort über eine periodische Zeitabhängigkeit verfügt. Kohärente Zustände können u. A. verwendet werden um Laser zu beschreiben⁵¹.

⁴⁹vgl. Lichtenegger (2015), S. 149

⁵⁰vgl. Annett (2004), S. 102f.

⁵¹vgl. Annett (2004), S. 123f.

3 Vergleich des klassischen und quantenmechanischen harmonischen Oszillators

Das Korrespondenzprinzip verlangt u. A., dass mikroskopisch-quantenmechanische Phänomene über Grenzfälle verfügen müssen, die sich in makroskopischen – also klassischen – Phänomenen widerspiegeln. Da sich jedoch im Falle des harmonischen Oszillators die klassische und quantenmechanische Betrachtung fundamental unterscheiden, ist es interessant zu diskutieren, unter Bedingungen klassische Näherungen erzielt werden können. Das kann zumindest anhand dreierlei Aspekten untersucht werden: der Zeitentwicklung, der Aufenthaltswahrscheinlichkeit und der Energie.

Ersteres wurde bereits in Kapitel 2.4 vorweggenommen: Ein stationärer Zustand, der allgemein nichts mit seinem klassischen Analogon gemein hat, kann einer zeitlichen Entwicklung unterzogen werden um klassische Eigenschaften zu gewinnen. Somit werden kohärente Zustände erhalten, die ihren klassischen Pendants schon etwas ähnlicher sind, da sie über Grundzustandsoszillationen verfügen.

Es können jedoch auch klassische Näherungen anhand des Vergleichs der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten (Kapitel 3.1) sowie über energetische Überlegungen (Kapitel 3.2) erreicht werden.

3.1 Vergleich klassischer und quantenmechanischer Aufenthaltswahrscheinlichkeit

Zum Abschluss der Großkapitel 1 und 2 wird nun die klassische und quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit verglichen. Im klassischen Falle wird hierfür der Ort als Funktion der Zeit $x(t)$ eines Teilchens mit der Masse m betrachtet, das die Bewegung

$$x(t) = A \sin(\omega t) \tag{3.1}$$

mit der Energie (vgl. (1.15))

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 A^2 \tag{3.2}$$

ausführt.

Um eine Art 'klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit'⁵² $W_{kl}(x)$ zu beschreiben, wird zunächst die Amplitude der Form (1.27) umgeformt:

$$A = \sqrt{x^2 + \frac{\dot{x}^2}{\omega^2}} \Leftrightarrow \dot{x} = \omega (A^2 - x^2). \quad (3.3)$$

Das Zeitelement dt ist jene Zeit, die das Teilchen benötigt um das Ortselement dx zu durchqueren. Für eine gesamte Periode $T = 2\pi/\omega$ ist dann die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Intervall $[x, x + dx]$ anzutreffen, durch

$$W_{kl}(x) dx = 2 \frac{dt}{T} \Leftrightarrow W_{kl} = \frac{2}{T} \frac{dt}{dx} = \frac{2}{T \dot{x}} \quad (3.4)$$

gegeben. Mit \dot{x} aus (3.3) und $T = 2\pi/\omega$ wird somit

$$W_{kl}(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{A^2 - x^2}} \quad (3.5)$$

erhalten. Klassisch kann die Amplitude nicht überschritten werden, da diese schließlich als *maximale* Auslenkung des Teilchens definiert ist. Ebenso sind beim klassischen harmonischen Oszillator imaginäre oder komplexe Lösungen physikalisch nicht sinnvoll. Demnach gilt

$$W_{kl}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\pi \sqrt{A^2 - x^2}} & \text{für } |x| < A \\ 0 & \text{für } |x| \geq A. \end{cases} \quad (3.6)$$

Damit divergiert W_{kl} wie erwartet bei den Umkehrpunkten der klassischen Bewegung, was auf Abb. 3.1 zu erkennen ist. Wie steht es nun mit der Normierungsbedingung von $W_{kl}(x)$? Hierfür wird W_{kl} zwischen den beiden Amplitudenwerten A und $-A$ integriert:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} W_{kl}(x) dx &= \int_{-A}^A \frac{1}{\pi \sqrt{A^2 - x^2}} \\ &= \frac{1}{\pi} \arcsin(x/A) \Big|_{-A}^A \\ &= \frac{1}{\pi} (\arcsin(1) - \arcsin(-1)) \\ &= \frac{1}{\pi} \left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} \right) \\ &= 1. \end{aligned} \quad (3.7)$$

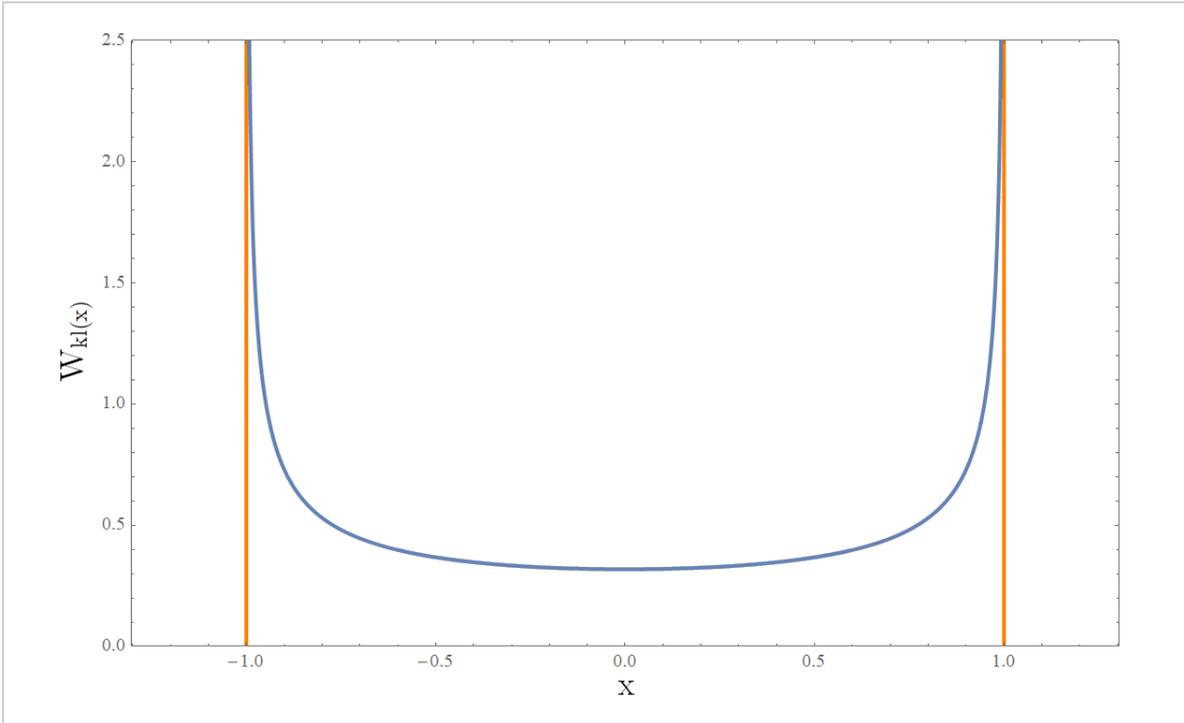


Abbildung 3.1: Aufgezeichnet ist hier die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit $W_{kl}(x)$ (Blau) in der Form (3.6) als Funktion des Ortes x mit einer Amplitude von $A = 1$. Die klassischen Grenzen, die durch die Amplitude bestimmt sind (Orange) liegen demnach bei $+1$ und -1 . Zu erkennen ist, dass die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit komplett innerhalb der klassischen Grenzen liegt.

Es ist zu erkennen, dass wie erwartet die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen innerhalb der Amplitude anzutreffen, 100 % beträgt. Somit ist ein Aufenthalt des Teilchens außerhalb der Amplitude klassisch unmöglich (vgl. Abb. 3.1). Dies ist jedoch bei geringen n -ten Energieniveaus des quantenmechanischen Oszillators nicht so!

Beim quantenmechanischen harmonischen Oszillator hat die Wellenfunktion eine maximale Wahrscheinlichkeit bei $x = 0$, wie auf Abb. 3.2 zu erkennen ist. Dies steht in massivem Kontrast zum klassischen harmonischen Oszillator, der über eine minimale Wahrscheinlichkeit bei $x = 0$ und eine maximale bei Wendepunkten verfügt (vgl. Abb. 3.1).⁵³ Die Grenzen, bis zu welchen sich ein Teilchen aufhalten kann,

⁵²vgl. Powell et al. (1961), S. 135ff.

⁵³vgl. Lichtenegger (2015), S. 148

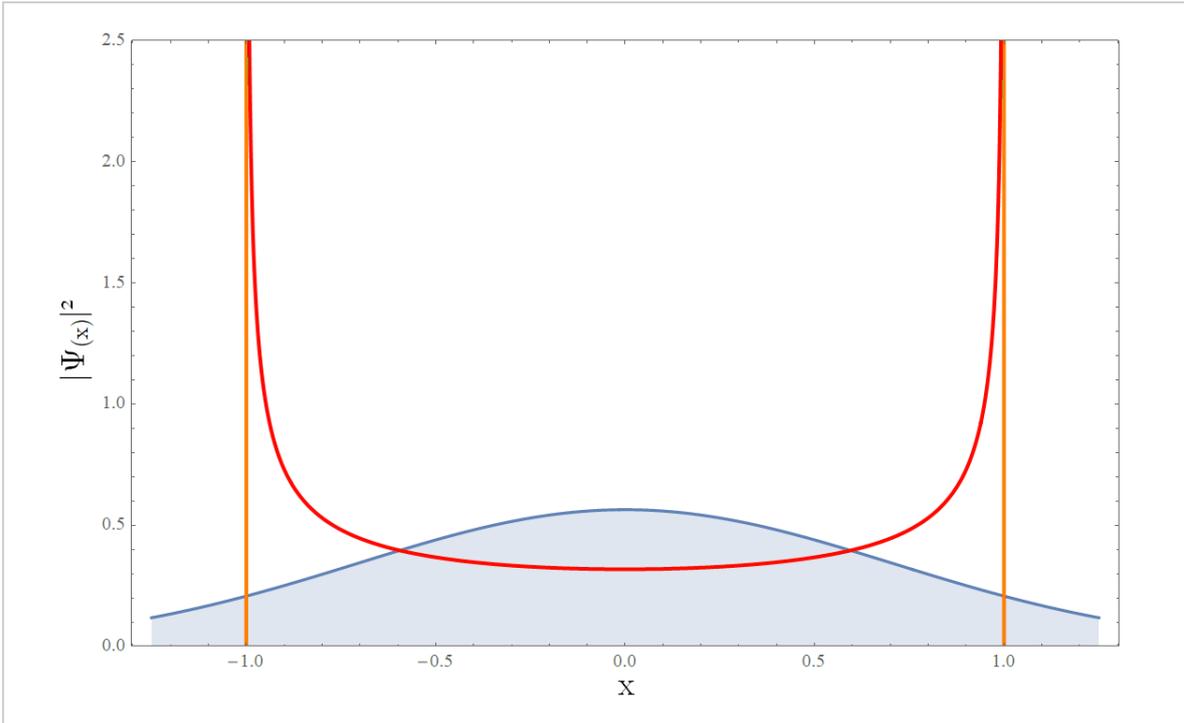


Abbildung 3.2: Zu sehen ist die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Grundzustandes $|\psi_0(x)|^2$ (Blau), sowie die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit (Rot) und die Grenzen dieser (Orange) (vgl. Abb. 3.1). Dabei wurde (2.47) vereinfacht indem m , \hbar und ω gleich 1 gesetzt wurden, wodurch $\psi_0(x) = \pi^{(-1/4)} e^{-x^2/2}$ erhalten wird. Zu beachten sind die massiv unterschiedlichen Wahrscheinlichkeitsverteilungen des klassischen und des quantenmechanischen harmonischen Oszillators. Ebenso ist hier zu erkennen, dass Teilchen beim Quantenoszillator in klassisch verbotene Regionen jenseits der Amplituden auftreten können!

werden beim klassischen Oszillator strikt eingehalten. Im Gegensatz dazu ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Quantenoszillator jenseits der klassischen Grenze nicht gleich Null (siehe Abb. 3.2).

Die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Quantenoszillator hat allgemein $n+1$ Maxima und n Minima (vgl. Abb. 3.3). Dies bedeutet, dass es für den n -ten Quantenzustand genau n verbotene Stellen gibt, bei welchen die Aufenthaltswahrscheinlichkeit gleich Null ist.⁵⁴ Dies unterscheidet sich vom klassischen Fall, bei dem das Teilchen an jedem Ort innerhalb der Grenzen angetroffen werden kann (vgl. Abb. 3.1). Bei hohen

⁵⁴vgl. Lichtenegger (2015), S. 340

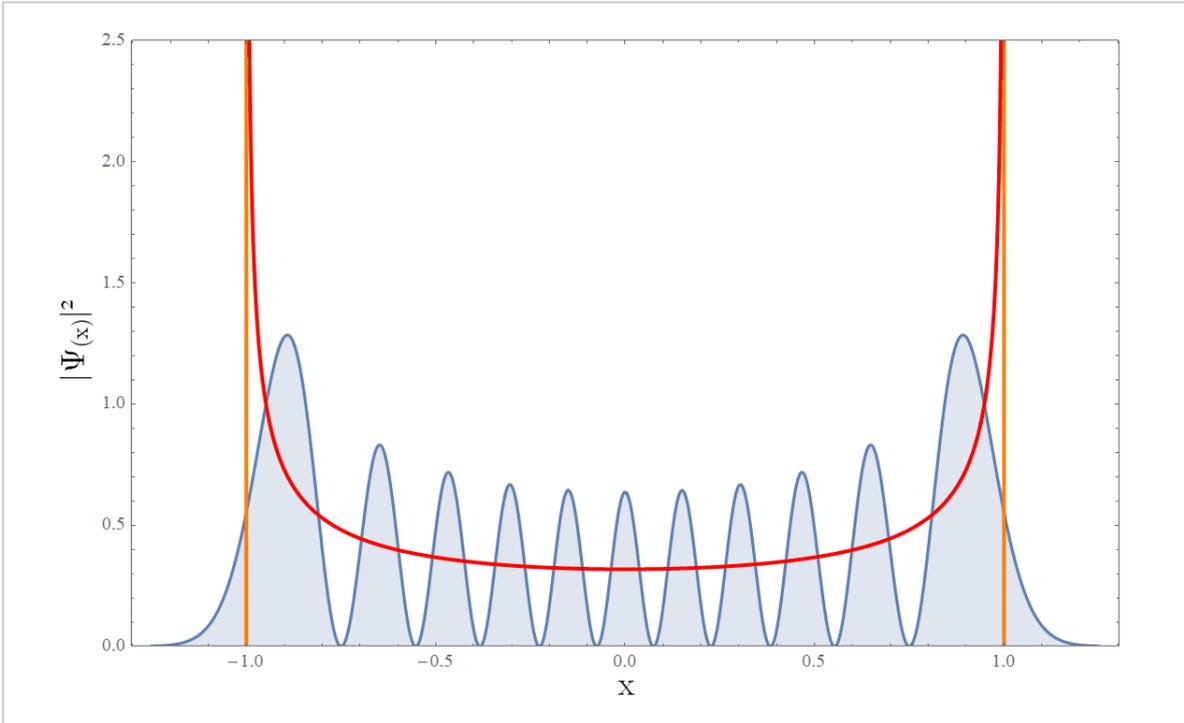


Abbildung 3.3: Dargestellt ist hier die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi_n(x)|^2$ für $n=10$ (Blau), wobei (2.56) vereinfacht wurde indem m , \hbar und ω gleich 1 gesetzt wurden. Somit wurde die Funktion $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{x^2/2} H_n(x)$ erhalten. Zu erkennen ist, dass die Maxima in der Nähe der klassischen Grenzen (Orange) zunehmend größer werden und gleichzeitig die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in den klassisch verbotenen Bereichen abnimmt. Im Vergleich zu Abb. 3.2 ist bereits eine Annäherung zur klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit (Rot) zu erkennen.

n ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Oszillators in der Nähe der Wendepunkte größer als in der Mitte. Dieser Trend ist bereits bei $n = 10$ (siehe Abb. 3.3) zu erkennen, wird jedoch besonders bei deutlich bei $n = 100$ (siehe Abb. 3.4). Bei noch höheren n werden die Minima zwischen den Maxima der Wahrscheinlichkeitsdichte zunehmend kleiner (siehe Abb. 3.4); bis sie schließlich einen Abstand unterschreiten, der kleiner ist als es die heisenbergsche Unschärferelation zulassen würde. Somit wären die Minima effektiv 'ausgelöscht' worden, wodurch sich die Form der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsdichte zunehmend der klassischen nähert.⁵⁵

⁵⁵vgl. Lichtenegger (2015), S. 340

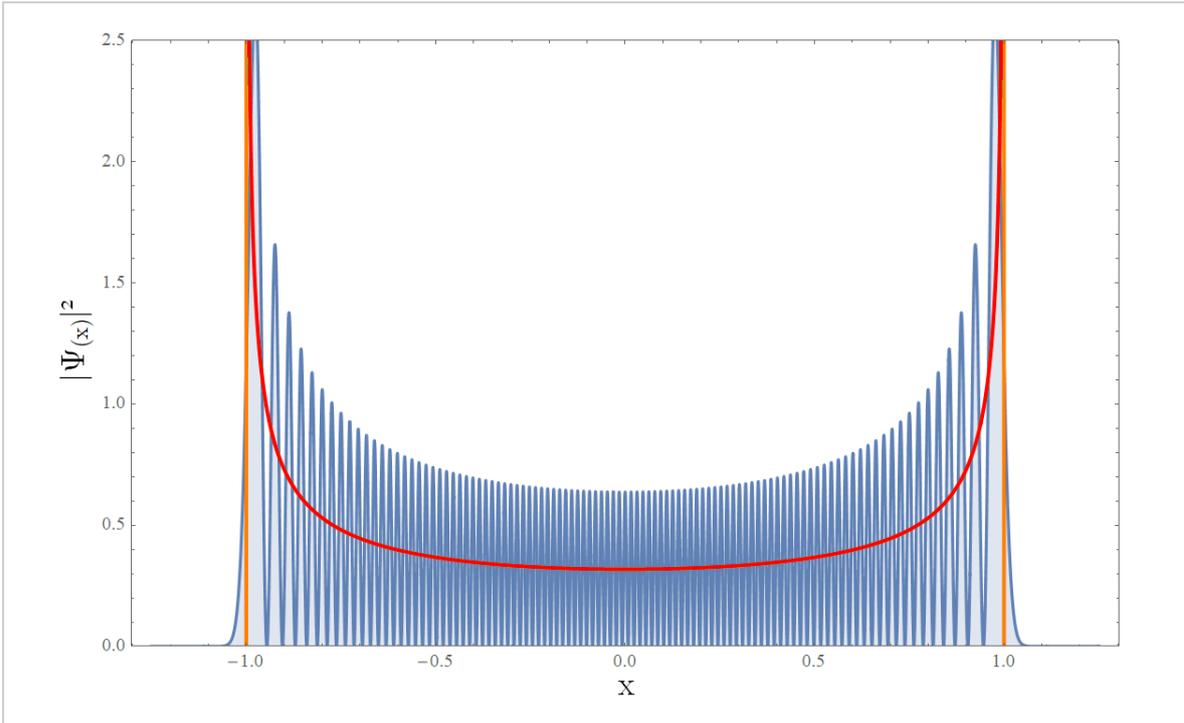


Abbildung 3.4: Die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi_n(x)|^2$ für $n = 100$. Dabei wurde wie bei Abb. 3.3 die Funktion $\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{x^2/2} H_n(x)$ aus (2.56) gewonnen und aufgezeichnet. Bei $n = 100$ ist erkennbar, dass sich die Wahrscheinlichkeitsdichte von $|\psi_{100}(x)|^2$ (Blau) der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit (Rot) deutlich annähert.

Der Bereich der quantenmechanischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit von ungleich Null außerhalb der klassischen Grenzen verschwindet bei ausreichend hohen Energieniveaus zunehmend, sodass dieser Bereich letztendlich aufgrund der Unschärferelation nicht mehr messbar ist. Das ist insbesondere dann erkennbar, wenn die Bereiche der Aufenthaltswahrscheinlichkeit jenseits der klassischen Grenzen auf den Abbildungen 3.3 und 3.4 verglichen werden.

Somit geht der quantenmechanische harmonische Oszillator graduell in den klassischen harmonischen Oszillator über. Dieser Übergang vom quantenmechanischen zum klassischen Verhalten ist ein Teils des Korrespondenzprinzips, das vom dänischen Physiker Niels Bohr geprägt wurde.⁵⁶

⁵⁶vgl. Nolting (2014), S. 148f.

3.2 Ein quantenmechanischer harmonischer Oszillator in Menschengröße

Abseits von der Aufenthaltswahrscheinlichkeit und den kohärenten Zuständen kann auch mithilfe des Korrespondenzprinzips ein klassischer Grenzfall über die Energie des Quantenoszillators erreicht werden.⁵⁷ In Kapitel 2.2.2 konnte ein gravierender energetischer Unterschied festgestellt werden: Die Nullpunktenergie ist klassisch nicht verständlich, da klassisch u. A. das Energieminimum auch gleich Null sein kann. Wie bereits bekannt, besitzt der quantenmechanische harmonische Oszillator über eine Gesamtenergie, die als Set an diskreten Werten verstanden werden kann (2.56).

Bei einem klassischen harmonischen Oszillator mit einer Masse m , die an einem Ende einer Feder befestigt ist, werden jedoch keine diskreten Energiewerte wahrgenommen. Die Energie scheint in diesem makroskopischen System kontinuierlich zu verlaufen. Es lässt sich jedoch zeigen, dass dieses makroskopische System mit dem Korrespondenzprinzip aus dem Quantenoszillator heuristisch hergeleitet werden kann.

Die Energie des klassischen harmonischen Oszillators – ausgedrückt über die Amplitude der Form (1.15) – beträgt

$$E = \frac{m \omega^2 A^2}{2}. \quad (3.8)$$

Damit kann die Quantenzahl n aus (2.56) als

$$n = \frac{E}{\hbar \omega} - \frac{1}{2} = \frac{m \omega A^2}{2\hbar} - \frac{1}{2} \quad (3.9)$$

ausgedrückt werden⁵⁸.

⁵⁷vgl. Weidner et al. (1973), S. 171f.

⁵⁸Genau genommen ist dies eine etwas 'unsaubere' Betrachtung, da klassische und quantenmechanische Annahmen recht stur in Zusammenhang gebracht werden, die streng genommen über keine Relation verfügen, wie beispielsweise die klassische Amplitude A und die Quantenzahl n . Trotzdem liefert diese Überlegung relevante Einsichten bzgl. des Überganges von mikro- in makroskopische Systeme.

Um nun ein makroskopisches System zu simulieren, werden für die Variablen alltägliche Werte angenommen: $m = 1 \text{ kg}$, $\omega = 1 \text{ rad/s}$ bzw. $A = 1 \text{ m}$. Eingesetzt in die obige Gleichung liefert dies

$$n = \frac{1}{2\hbar} - \frac{1}{2} \approx \frac{1}{\hbar} \approx \frac{1}{10^{-34}} = 10^{34}. \quad (3.10)$$

Dabei ist unschwer zu erkennen, dass mit einer Quantenzahl von ca. 10^{34} bei einem makroskopischen harmonischen Oszillator ein klassisches Limit erreicht wird. Demnach sind die energetischen Unterscheide zwischen den einzelnen Zuständen ca. $\hbar\omega \approx 10^{-34} \text{ J}$, was deutlich unter der Auflösungskapazität moderner Technologien für makroskopische Systeme liegt.

Daher treten die quantenmechanischen Phänomene, wie etwa diskrete Energieniveaus oder Aufenthaltswahrscheinlichkeiten in klassisch verbotenen Bereichen, für solche Oszillatoren in nicht relevanter Frequenz auf. Somit ist die klassische Betrachtung des harmonischen Oszillators keineswegs obsolet – sie ist lediglich ein Grenzfall der exakteren quantenmechanischen Beschreibung.

3.3 Zusammenfassung des harmonischen Oszillators bisher

- In der Physik können zahlreiche Systeme in guter Näherung durch das Modell des harmonischen Oszillators beschrieben werden. Zentral bei jenen Systemen ist eine periodische Bewegung um eine Ruhelage, welche durch eine lineare Rückstellkraft erwirkt wird. Dies ist sowohl klassisch als auch quantenmechanisch der Fall.
- Ein typisches, klassisches Beispiel wäre das Federpendel, welches in Kapitel 1.1 behandelt wurde. Bei diesem ist ein Teilchen mit der Masse m an einer hypothetischen Feder mit der Federkonstante k_F befestigt und führt Oszillationen um eine Ruhelage $x = 0$ aus. Die klassische Bewegungsgleichung (vgl. (1.3)) dieses Teilchens lautet

$$F_{Newton} = F_{Feder} \quad \Leftrightarrow \quad m \ddot{x} = -k x \quad \Leftrightarrow \quad m \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + k x = 0, \quad (3.11)$$

mit der simplen Lösung $x(t) = A \sin(\omega t + \varphi)$, wobei A die Amplitude, $\omega = \sqrt{k/m}$ die Kreisfrequenz und φ die Phase darstellen. Das System des harmonischen Oszillators kann eleganter beschrieben werden, wenn auf k_F verzichtet wird. Im Gegensatz zur Federkonstante k_F verkörpern ω und m rein physikalische und keine phänomenologischen Größen.

- Die Darstellung des harmonischen Oszillators in der klassischen Hamiltondynamik ist ein essentieller Schritt in die Richtung der quantenmechanischen Beschreibung des harmonischen Oszillators. Die Hamiltonfunktion des harmonischen Oszillators in der klassischen Hamiltondynamik (vgl. (1.30)) lautet

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2, \quad (3.12)$$

mit welcher die hamiltonschen Gleichungen $\dot{q} = p/m$ und $\dot{p} = -m\omega^2 q$ (vgl. (1.31)) erhalten werden. Diese sind äquivalent zur klassischen Bewegungsgleichung des harmonischen Oszillators (vgl. (1.33)):

$$\ddot{q} + \omega^2 q = 0 \quad \Leftrightarrow \quad m \ddot{x} = -k x. \quad (3.13)$$

- Die stationäre Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators (vgl. (2.12)) lautet

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi(x) = E\psi(x), \quad (3.14)$$

wobei

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \underbrace{\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}_{\psi_0(x)} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad (3.15)$$

die Eigenzustände (vgl. (2.56)) mit den Energieeigenwerten

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{mit} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.16)$$

darstellt (vgl. (2.39)).

- Klassisch betrachtet ist die niedrigste Energie des harmonischen Oszillators $E = 0$, quantenmechanisch hingegen jedoch $E = \hbar\omega/2$! Dies stellt den zentralen Unterschied zwischen der klassischen und der quantenmechanischen Betrachtung dar, da der der quantenmechanische harmonische Oszillator über

eine endliche Grundzustandsenergie verfügt, die sogenannte *Nullpunktenergie*. Diese verfügt über einen interessanten Zusammenhang mit der heisenbergschen Unschärferelation $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$, da die Nullpunktenergie den kleinsten mit der Unschärferelation vereinbaren Energiewert darstellt (vgl. (2.63)).

- Für die Lösungen der stationären Schrödingergleichung $\psi_n(x)$ ist der Ortserwartungswert des Grundzustandes $\langle x \rangle_\psi = 0$ (vgl. (2.57)), was bedeutet, dass in diesen stationären Zuständen keine Oszillationen stattfinden. Demnach haben diese Zustände insbesondere nichts mit der klassischen Oszillationsbewegung gemein, welche immer eine zeitabhängige Bewegung ausführen. Es lassen sich jedoch zeitabhängige Zustände $\psi_n(x, t)$ finden, bei welchen $\langle x \rangle_\psi$ eine periodische Oszillation ausführt und somit über eine mit der klassischen Schwingung vergleichbare Zeitabhängigkeit verfügt (vgl. (2.95)). Solche Zustände werden als *kohärente Zustände* bezeichnet.
- Ein weiterer interessanter Unterschied zwischen der klassischen und quantenmechanischen Beschreibung des harmonischen Oszillators geht aus dem Vergleich der entsprechenden Aufenthaltswahrscheinlichkeiten hervor: Klassisch steigt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei den Umkehrpunkten (d. h. bei der Amplitude) an und ist in der Ruhelage am niedrigsten (vgl. Abb. 3.1). Quantenmechanisch verfügt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit mehrere Maxima und kann auch größer als die klassische Amplitude sein (vgl. Abb. 3.2). Das bedeutet, dass die Teilchen aus klassischer Sicht 'unmögliche' Orte erreichen können!
- Für sehr hohe Quantenzahlen n nähert sich die quantenmechanische der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit an. Dies kann u. A. durch die massiv unterschiedlichen Größenordnungen zwischen 'alltäglichen' Größen (wie z. B. 1kg) und dem planckschen Wirkungsquantum ($\approx 10^{-34}$) verdeutlicht werden (vgl. (3.10)).

4 Der harmonische Oszillator in der modernen Physik

In diesem Kapitel werden die quantenmechanischen Überlegungen aus Kapitel 3 weitergeführt indem ausgehend von einer Generalisierung eines Ensembles von Quantenoszillatoren grundlegende Phänomene der zweiten Quantisierung diskutiert werden. Dabei werden u. A. Phononenschwingungen, Mehrteilchensysteme in der Besetzungszahldarstellung, fermionische, bosonische sowie supersymmetrische Systeme behandelt.

4.1 Auf zur zweiten Quantisierung: Die Teilchen vermehren sich

Die erste Quantisierung wurde in den 1920er Jahren von u. A. Werner Heisenberg und Erwin Schrödinger begründet. Die Bezeichnung beschreibt eine Relativierung der damals allgegenwärtigen Kontinuumsvorstellungen: Energie wird nun nur mehr in diskreten Quanten ausgetauscht statt in beliebigen und kontinuierlichen Mengen. Die zweite Quantisierung wurde in den späteren 1920er Jahren von Paul Dirac begründet und stellt einen Formalismus dar, der die Ideen der ersten Quantisierung weiterführt.⁵⁹ Mit den Postulaten der ersten Quantisierung konnten nur Systeme mit wenigen Teilchen effektiv behandelt werden. Systeme mit 10^{23} Teilchen, wie sie in der Festkörperphysik oder Thermodynamik üblich sind, sind aufgrund des hohen Rechenaufwands rein technisch unmöglich.⁶⁰

Ein viel größeres Manko der Quantenmechanik der ersten Quantisierung war jedoch die Tatsache, dass keine Systeme mit variierender Teilchenzahl beschrieben werden können. Bekanntlich werden ständig Teilchen erzeugt und vernichtet: Positronen und Elektronen annihilieren sich zu Lichtquanten; Elektronen können Photonen spontan emittieren und sofort wieder absorbieren; Protonen zerfallen zu Neutronen, Positronen und Elektron-Neutrinos; usw.

⁵⁹vgl. Lichtenegger (2015), S. 174

⁶⁰vgl. Rebhan (2010), S. 135f.

Konzeptuell betrachtet ist die zweite Quantisierung die Vorstufe der Quantenfeldtheorie, in welcher nicht nur Observablen sondern auch Felder quantisiert werden. In der Quantenfeldtheorie werden Teilchen als angeregte Zustände eines Feldes betrachtet, welche in gewissem Sinne noch fundamentaler sind als die Teilchen selbst.⁶¹ Plakativ ausgedrückt: Jedes Teilchen und jede Welle ist die Anregung eines Quantenfeldes, das sich über die gesamte Raumzeit erstreckt!

In dieser Arbeit wird die Quantenfeldtheorie zwar nicht weiter diskutiert, jedoch wird ein simplifizierter Zugang zur zweiten Quantisierung ausgehend vom Modell des quantenmechanischen harmonischen Oszillators dargestellt. Wie kommt man nun von einem quantenmechanischen harmonischen Oszillator zu einem Formalismus, mit dem man Vielteilchensysteme beschreiben kann?

In Kapitel 2.2 wurde gezeigt, dass durch die Leiteroperatoren \hat{a}^\dagger und \hat{a} ein Zustand ψ_n ausgehend vom Grundzustand ψ_0 angesteuert werden kann (vgl (2.52)). Für die Überlegungen in diesem Kapitel bietet sich jedoch eine etwas andere Notation der Zustände an: ein n -ter Zustand wird nun als $|n\rangle$ angeschrieben. Der Grundzustand ist dementsprechend nun $|0\rangle$. Somit kann (2.52) kosmetisch umgeschrieben werden:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0. \quad \Leftrightarrow \quad |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle. \quad (4.1)$$

Es wurde auch diskutiert, dass die Leiteroperatoren \hat{a}^\dagger und \hat{a} eine quantisierte Menge Energie 'vernichten' oder 'erzeugen' können: und zwar genau $\hbar\omega$. Was jedoch nicht untersucht wurde, war der Umstand, dass die Energiequanten $\hbar\omega$ wie Teilchen interpretiert werden können: schließlich werden durch die Anwendung von Operatoren Teilchen addiert bzw. subtrahiert.⁶² Somit wurde durch diese Operatoren der Traum der zweiten Quantisierung verwirklicht: Ein Wellenproblem hat spontan Partikel erzeugt!

Als nächstes kann eine relativ simple Generalisierung – die später jedoch relevant wird – des harmonischen Oszillators vollzogen werden. Dabei werden N entkoppelte

⁶¹vgl. Lichtenegger (2015), S. 265

⁶²vgl. Aitchison et al. (2013), S. 133

Oszillatoren betrachtet. Sie reden nicht miteinander, sehen sich nicht und stehen auch nicht in Wechselwirkung zueinander. Der gemeinsame Hamiltonoperator \hat{H} dieses Systems ist folglich die Summe der einzelnen Hamiltonoperatoren⁶³ \hat{H}_k :

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \hat{H}_k = \sum_{k=1}^N \frac{\hat{p}_k^2}{2m_k} + \frac{1}{2} m_k \omega_k^2 \hat{x}_k^2. \quad (4.2)$$

Nun kann der Erzeugungsoperator \hat{a}_k^\dagger definiert werden, der ein Energiequantum im k -ten Oszillator erzeugt und alle anderen Oszillator unbeeinflusst lässt:

$$\hat{a}_k^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_k\rangle \propto |n_1, n_2, \dots, n_k + 1\rangle. \quad (4.3)$$

Analog dazu wird ein Vernichtungsoperator \hat{a}_k definiert, der nur auf den k -ten Oszillator wirkt:

$$\hat{a}_k |n_1, n_2, \dots, n_k\rangle \propto |n_1, n_2, \dots, n_k - 1\rangle. \quad (4.4)$$

Diese Operatoren kommutieren ähnlich wie (2.28), sofern sie auf den gleichen Oszillator wirken. Die Operatoren, die auf verschiedene Oszillatoren wirken, kommutieren miteinander, d. h. sie beeinflussen sich nicht⁶⁴:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_k, \hat{a}_q] &= 0 \\ [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_q^\dagger] &= 0 \\ [\hat{a}_k, \hat{a}_q^\dagger] &= \delta_{kq}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Somit kann der Hamiltonoperator ähnlich wie (2.29) ausgedrückt werden:

$$\hat{H} = \sum_{k=1}^N \hbar \omega_k \left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2} \right). \quad (4.6)$$

Als nächstes kann ein Grundzustand aller Oszillatoren, der Vakuumzustand $|0\rangle$, so definiert werden, dass für alle k

$$\hat{a}_k |0\rangle = 0 \quad (4.7)$$

gilt.⁶⁵ Genaugenommen sollte der Vakuumzustand $|0, 0, 0, 0, \dots\rangle$ lauten. Der Einfachheit halber wird er mit $|0\rangle$ abgekürzt. Allgemein betrachtet kann ein genereller

⁶³vgl. Feynman (1982), S. 158

⁶⁴vgl. Lichtenegger (2015), S. 174

⁶⁵vgl. Annett (2004), S. 104

Zustand des Systems als $|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle$ angeschrieben werden, was als die *Besetzungszahldarstellung* bezeichnet wird. Analog wie (2.52) erhalten wurde, kann ein ähnlicher Term für das hier skizzierte System beschrieben werden (vgl. (4.1)):

$$|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! \cdot n_2! \cdot \dots \cdot n_N!}} (\hat{a}^\dagger)^{n_1} (\hat{a}^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{a}^\dagger)^{n_N} |0\rangle. \quad (4.8)$$

Die Idee hinter diesem Ausdruck ist die Notwendigkeit eines Produkts an Erzeugungsoperatoren, welches auf den Vakuumzustand wirkt, um n_1 Energiequanten im Oszillator 1, n_2 Energiequanten im Oszillator 2, ... n_N Energiequanten im Oszillator N zu erzeugen. Der obige Ausdruck kann auch kompakter angeschrieben werden⁶⁶:

$$|\{n_k\}\rangle = \prod_k \frac{1}{\sqrt{n_k}} (\hat{a}_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle. \quad (4.9)$$

4.2 Gitterschwingungen in der Festkörperphysik

In der Festkörperphysik werden die quantisierten Gitterschwingungen eines Festkörpers Phononen genannt – in phonetischer Anlehnung an Photonen, den quantisierten Schwingungen des elektromagnetischen Feldes. Zuvor wurde ein Kollektiv an entkoppelten harmonischen Oszillatoren betrachtet. Um die Phononen in einem Festkörper beschreiben zu können, müssen diese als Ansammlung gekoppelter harmonischer Oszillatoren erfasst werden.⁶⁷

Für einen simplen mathematischen Zugang hierfür, kann eine lineare Kette an N Atomen betrachtet werden, welche über die Masse m verfügen und über hypothetische 'Federn', der Länge a und der Federkonstante K , verbunden sind (siehe Abb. 4.1).

Die Massen haben ihre Ruhelage bei $R_j = ja$, können jedoch um einen Faktor x_j bewegt werden, wobei der Impuls der j -ten Masse p_j ist.⁶⁸ Der Hamiltonoperator zu diesem System lautet

$$\hat{H} = \sum_j \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \frac{1}{2} K (\hat{x}_{j+1} - \hat{x}_j)^2. \quad (4.10)$$

⁶⁶vgl. Feynman (1982), S. 159

⁶⁷vgl. Feynman (1982), S. 159f.

⁶⁸vgl. Fließbach et al. (2012), S. 100

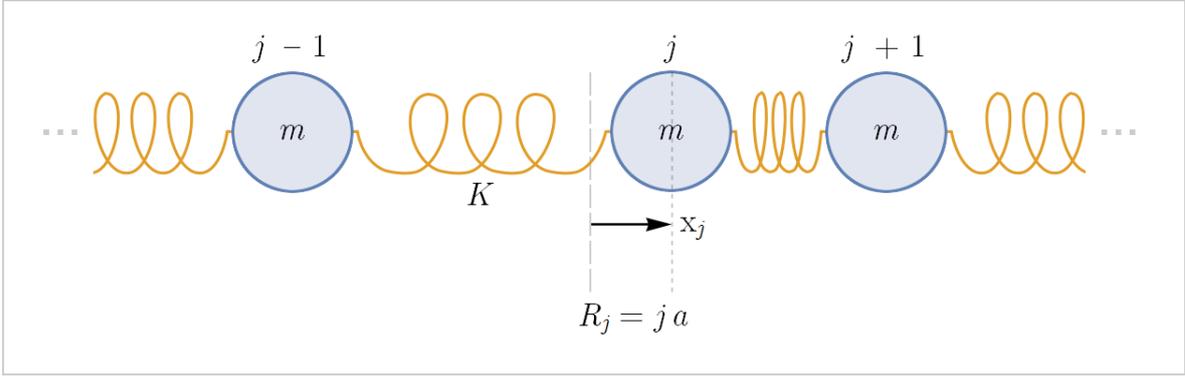


Abbildung 4.1: Dargestellt ist hier eine Skizze des Modells, durch welches ein Festkörper angenähert werden kann indem er als Ensemble an harmonisieren quantenmechanischen Oszillatoren betrachtet wird. Konkret ist ein Ausschnitt einer linearen Kette an Atomen zu erkennen. Die Atome verfügen über die Masse m , und sind mit benachbarten Atomen über K gekoppelt. Bei einer Auslenkung des j -ten Atoms entfernt sich das Atom um x_j von der Ruhelage bei R_j .

Somit ist jede Masse stark an die Nachbarmassen gekoppelt und kann unmöglich unabhängig von diesen beschrieben werden. Trotzdem kann gezeigt werden, dass die einzelnen Anregungen in diesem System als Kollektiv von entkoppelten harmonischen Oszillatoren betrachtet werden können! Zentral für diese Überlegung ist die Fouriertransformation des Systems, sodass die Anregungen im *Reziprokraum* entkoppelt sind, obwohl die Massen im *Realraum* immer noch gekoppelt sind. Hierfür wird zunächst die Fouriertransformation für die k -ten bzw. j -ten Orts- und Impulsoperatoren⁶⁹ x_j und p_j formuliert⁷⁰

$$\begin{aligned} x_j &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \tilde{x}_k e^{ikja} \\ p_j &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \tilde{p}_k e^{ikja}, \end{aligned} \tag{4.11}$$

⁶⁹Zwecks Übersichtlichkeit sind die Operatoren in den folgenden Rechnungen ohne 'Hut' angeschrieben. Das heißt jedoch nicht, dass sie keine Operatoren mehr sein sollen!

⁷⁰vgl. Coleman (2015), S. 24

sowie

$$\begin{aligned}\tilde{x}_k &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j x_j e^{-ikja} \\ \tilde{p}_k &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j p_j e^{-ikja}.\end{aligned}\tag{4.12}$$

Wie in der Festkörperphysik üblich werden nun periodische Randbedingungen⁷¹ festgelegt, sodass

$$e^{ikja} = e^{ik(j+N)a}\tag{4.13}$$

gilt.⁷² Die Operatoren kommutieren zunächst ähnlich wie ihre quantenmechanischen Pendanten mit $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$:

$$[x_j, p_{j'}] = i\hbar\delta_{jj'},\tag{4.14}$$

wobei sich für den Kommutator von \tilde{x}_k und $\tilde{p}_{k'}$

$$\begin{aligned}[\tilde{x}_k, \tilde{p}_{k'}] &= \frac{1}{N} \sum_j \sum_{j'} e^{-ikja} e^{-ik'j'a} [x_j, p_{j'}] \\ &= \frac{i\hbar}{N} \sum_j e^{-i(k+k')ja} \\ &= i\hbar\delta_{k,-k'}\end{aligned}\tag{4.15}$$

ergibt.

Somit können nun die Terme des Hamiltonoperators (4.10) für dieses System bestimmt werden. Für die Impulsoperatoren ergibt sich

$$\begin{aligned}\sum_j p_j^2 &= \sum_j \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \tilde{p}_k e^{ikja} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} \tilde{p}_{k'} e^{ik'ja} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_j \sum_k \sum_{k'} \tilde{p}_k \tilde{p}_{k'} e^{i(k+k')ja} \\ &= \frac{1}{N} \sum_j \sum_{kq} \tilde{p}_k \tilde{p}_q e^{i(k+q)ja}.\end{aligned}\tag{4.16}$$

⁷¹Dies bewirkt im Grunde eine Kompaktifizierung. Es wird ein unendliches Medium an Teilchen durch die Betrachtung einer einzelnen Zelle mit periodischen Randbedingungen untersucht. In dieser Zelle treten Teilchen, die am Rand der Zelle austreten, am gegenüberliegenden Rand wieder ein.

⁷²vgl. Fließbach et al. (2012), S. 102

Mit der Identität $\sum_j e^{i(k-k')ja} = N\delta_{kk'}$ und der Summierung der Impulse per Kronecker-Delta folgt $q = -k$, sodass ein einziger Index verbleibt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_j \sum_{kq} \tilde{p}_k \tilde{p}_q e^{i(k+q)ja} &= \sum_{pq} \tilde{p}_k \tilde{p}_q \delta_{k,-q} \\ &= \sum_k \tilde{p}_k \tilde{p}_{-k}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Durch die Kombination der Summierung über einen Ortsindex und zwei Impulsindizes wird folgender Ausdruck erhalten:

$$\sum_j p_j^2 = \sum_k \tilde{p}_k \tilde{p}_{-k}. \quad (4.18)$$

Ähnlich kann auch der zweite Term des Hamiltonoperators (4.10) $\sum_j (\hat{x}_{j+1} - \hat{x}_j)^2$ bestimmt werden

$$\begin{aligned} \sum_j (\hat{x}_{j+1} - \hat{x}_j)^2 &= \frac{1}{N} \sum_j \sum_k \sum_{k'} \tilde{x}_k \tilde{x}_{k'} e^{i(k+k')ja} (e^{ika} - 1) (e^{ik'a} - 1) \\ &= \sum_k \tilde{x}_k \tilde{x}_{-k} \left(4 \sin \frac{ka}{2} \right). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Mit $1 - \cos \frac{ka}{2}$ und (4.18) kann der fouriertransformierte Hamiltonoperator (2.57) als

$$\hat{H} = \sum_j \frac{1}{2m} \tilde{p}_k \tilde{p}_{-k} + \frac{1}{2} m \omega_k^2 \tilde{x}_k \tilde{x}_{-k} \quad (4.20)$$

ausgedrückt werden, wobei $\omega_k^2 = 4K/m \sin^2(ka/2)$ gilt.⁷³

Hervorzuheben sind einige günstige Zusammenhänge zwischen den Orts- und Impulsoperatoren:

$$\begin{aligned} \tilde{p}_k^\dagger &= \tilde{p}_{-k} \\ \tilde{x}_k^\dagger &= \tilde{x}_{-k} \\ \Rightarrow [\tilde{x}_k, \tilde{p}_k^\dagger] &= i \hbar \delta_{kk'}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Für die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ergibt sich damit⁷⁴

$$\begin{aligned} \hat{a}_k &= \sqrt{\frac{m \omega_k}{2\hbar}} \left(\tilde{x}_k + \frac{1}{m \omega_k} \tilde{p}_k \right) \\ \hat{a}_k^\dagger &= \sqrt{\frac{m \omega_k}{2\hbar}} \left(\tilde{x}_k - \frac{1}{m \omega_k} \tilde{p}_k \right), \end{aligned} \quad (4.22)$$

⁷³vgl. Coleman (2015), S. 25

⁷⁴vgl. Coleman (2015), S. 26

welche wie folgt kommutieren:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger] &= 0 \\ [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] &= \delta_{kk'}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Die Operatoren (4.22) können natürlich wieder für Orts- und Impulsoperatoren ausgedrückt werden

$$\begin{aligned} \tilde{x}_k &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} \left(\hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger \right) \\ \tilde{p}_k &= -i \sqrt{\frac{m\hbar\omega_k}{2}} \left(\hat{a}_k - \hat{a}_{-k}^\dagger \right), \end{aligned} \quad (4.24)$$

mit welchen der Hamiltonoperator neu angeschrieben werden kann:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2} \left(\hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k} \right) \\ &= \sum_k \frac{\hbar\omega_k}{2} \left(\underbrace{\hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger}_{=\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + 1} + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \right) \\ \Rightarrow \hat{H} &= \sum_k \hbar\omega_k \left(\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Mit diesem Beispiel konnte gezeigt werden, wie ein Hamiltonoperator durch ein Set von gekoppelten Massen als die Summe von k Termen repräsentiert werden kann, wobei (4.25) und (4.6) ident sind! Demnach ist klar, dass sich die Phononen wie ein Set an entkoppelten harmonischen Oszillatoren verhalten, wobei jedes Phonon durch ein Vielfaches des Energiequantums $\hbar\omega_k$ beschrieben werden kann.

Dies ist der zentrale Punkt – jedes Phonon verhält sich wie ein harmonischer Oszillator und kann daher durch diskrete Energiepakete angeregt werden, da die Energieeigenwerte des harmonischen Oszillators Vielfache von $\hbar\omega_k$ sind. Somit können diese Vielfache von $\hbar\omega_k$ als Partikel angesehen werden.⁷⁵

Dadurch konnte in diesem Kapitel ein essentieller Aspekt der zweiten Quantisierung diskutiert werden: Ein harmonischer Oszillator im n -ten Energieniveau $E_n = (n + 1/2) \hbar\omega_k$ kann als Set von n Teilchen der Energie $\hbar\omega_k$ beschrieben werden.

⁷⁵vgl. Coleman (2015), S. 26f.

4.3 Von der Besetzungszahldarstellung zu Fermionen und Bosonen

Im vorherigen Kapitel wurde gezeigt, dass harmonische Oszillatoren teilchenartige Eigenfunktionen haben, wobei *en passant* eine für die zweite Quantisierung typische Darstellung eines Ensembles an entkoppelten harmonischen Oszillatoren gewählt wurde – die sogenannte Besetzungszahldarstellung. Dieser Ansatz kann auch angewendet werden um allgemein Systeme mit vielen Teilchen zu beschreiben. Dazu wird zum einen die Notation leicht verändert und zum anderen eine neue radikale Ansicht eingeführt, die das Betrachten von Wellenfunktionen obsolet macht: Die Wellenfunktionen werden komplett durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ersetzt.⁷⁶ Dabei ist zu beachten, dass die Teilchen weiterhin inhärent ununterscheidbar bleiben sollten. Daher müssen folgende Gesetzmäßigkeiten erfüllt werden:

- Es gibt zwei Teilchenarten: Bosonen und Fermionen.
- Wenn zwei idente Bosonen vertauscht werden, wird der ursprüngliche Zustand erhalten.⁷⁷
- Wenn zwei idente Fermionen vertauscht werden, wird der *negative* ursprüngliche Zustand erhalten.⁷⁸

Für einen simplifizierten Zugang zu diesem Ansatz wird zunächst ein Teilchen in einer Box betrachtet, wobei zwecks Übersicht $\hbar = 1$ gesetzt wird. Der Impulsoperator in x -Richtung kann als

$$\hat{p} = -i \frac{\partial}{\partial x} \quad (4.26)$$

angeschrieben werden. Die Lösungen der Schrödingergleichung für ein Teilchen in einer Box der Größe L sind

$$\psi(x) = \frac{1}{L} e^{ipx} \quad (4.27)$$

⁷⁶vgl. Coleman (2015), S. 42ff.

⁷⁷vgl. Coleman (2015), S. 44f.

⁷⁸vgl. Coleman (2015), S. 46f.

und die Eigenzustände des Impulsoperators

$$\hat{p} \psi(x) = -i \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = p \psi(x). \quad (4.28)$$

Wie auch im letzten Kapitel, werden periodische Randbedingungen gewählt, sodass $\psi(x) = \psi(x+L)$ gilt. Dies bewirkt, dass sich die Amplituden der Wellenfunktion an äquivalenten Positionen einer jeden Box befinden. Somit gilt $e^{ipx} = e^{ip(x+L)}$, woraus unmittelbar $e^{ipL} = 1$ folgt. Somit muss auch $pL = 2\pi m$ sein, wobei m vorläufig einfach eine ganze Zahl ist.

Durch diese Randbedingungen ergibt sich für die möglichen Impulszustände des Teilchens in der Box die Bedingung

$$p_m = \frac{2\pi m}{L}. \quad (4.29)$$

Diese möglichen Impulszustände werden mit p_1, p_2, \dots bezeichnet und die Energie eines einzelnen Teilchens im Zustand p_m ist E_{p_m} .

Nun kann ein relativ simples 'Vielteilchensystem' – bestehend aus zwei *bosonischen* Teilchen – untersucht werden. Wie verhält sich die Gesamtenergie und der Gesamtimpuls dieses Systems? Wird der Impulsoperator auf den Zweiteilchenzustand angewendet, wird

$$\hat{p} |p_1 p_2\rangle = (p_1 + p_2) |p_1 p_2\rangle \quad (4.30)$$

erhalten, wobei der Hamiltonoperator

$$\hat{H} |p_1 p_2\rangle = (E_{p_1} + E_{p_2}) |p_1 p_2\rangle \quad (4.31)$$

für die Energie des Systems liefert.

Da diese Teilchen nicht wechselwirken, ist beispielsweise eine Energie von $2E_{p_3}$ nötig um zwei Teilchen im Energiezustand p_3 zu halten, d. h. die doppelte Menge der Energie, die ein Teilchen benötigen würde. Demnach ist die Gesamtenergie durch

$$E_{ges} = \sum_m n_{p_m} E_{p_m} \quad (4.32)$$

gegeben, wobei n_{p_m} die Anzahl der Teilchen im Zustand $|p_m\rangle$ bezeichnet.

Wie angekündigt, wird nun die Notation geändert. Üblicherweise können in der Quantenmechanik idente Teilchen (z. B. Teilchen A , B und C) und ihre korrespondierenden Impulse mit z. B. $|ABC\rangle = |p_1 p_2 p_1\rangle$ angeschrieben werden. Dieser Zustand sagt, dass sich A und C im Impulszustand p_1 und B im Impulszustand p_2 befindet. Berücksichtigt man die Tatsache, dass Teilchen ununterscheidbar sind, lässt sich diese Schreibweise vereinfachen, indem man von den möglichen Impulszuständen $2\pi m/L$ ausgeht. Statt anzugeben, welche Teilchen in welchem Impulszustand sind, können die möglichen Impulszustände aufgelistet werden, wobei für jeden Impulszustand beschrieben wird, wie viele Teilchen sich in diesem befinden.⁷⁹ Somit kann die Aussage 'A und C sind im Impulszustand p_1 und B ist im Impulszustand p_2 ' umformuliert werden zu 'zwei Teilchen sind im Impulszustand p_1 und ein Teilchen ist im Impulszustand p_2 ', was nun als $|21000\dots\rangle$ angeschrieben wird. Allgemein ausgedrückt: Es wird ein Zustand mit N Teilchen definiert, wobei aufgelistet wird, wie viele Teilchen sich in welchem Impulszustand befinden: $|n_1 n_2 n_3 \dots\rangle$. Dies ist die 'sauberere' Formulierung der bereits erwähnten Besetzungszahldarstellung.⁸⁰

Was passiert nun wenn ein Hamiltonoperator auf einen Zustand in der Besetzungszahldarstellung angewendet wird? Es ist korrekt anzunehmen, dass die Anzahl der Teilchen in jedem Zustand mit der Energie des Zustandes multipliziert und über alle Zustände summiert wird:

$$\hat{H}|n_1 n_2 n_3 \dots\rangle = \left(\sum_m n_{p_m} E_{p_m} \right) |n_1 n_2 n_3 \dots\rangle. \quad (4.33)$$

Dies lässt sich jedoch mit den obigen Überlegungen eleganter ausdrücken. Da ein harmonischer Oszillator über n Energiequanten von $\hbar\omega$ verfügt, kann für N unabhängige Oszillatoren – indiziert mit k – die Gesamtenergie als $E_{ges} = \sum_{k=1}^N n_k \hbar\omega_k$ angeschrieben werden. Dies bedeutet, dass der k -te Oszillator über n_k Energiequanten verfügt und $n_k \hbar\omega_k$ zur Gesamtenergie beiträgt. Dies schaut der Gesamtenergie von identen Teilchen (4.32) verdächtig ähnlich! Ein Vergleich dieser zwei Energiesysteme zeigt einige interessante Analogien zwischen dem harmonischen Oszillator

⁷⁹vgl. Feynman (1982), S. 151ff.

⁸⁰vgl. Aitchison et al. (2013), S. 143f.

und identen Teilchen⁸¹:

Harmonischer Oszillator		Identen Teilchen
Quanten im Oszillator	\leftrightarrow	Teilchen in Impulszuständen
k -ter Oszillator	\leftrightarrow	m -ter Impulszustand p_m
$E_{ges} = \sum_{k=1}^N n_k \hbar \omega_k$	\leftrightarrow	$E_{ges} = \sum_{m=1}^N n_{p_m} E_{p_m}$

Diese Änderungen sind eher kosmetischer Natur. Angekündigt wurde auch eine radikale Neuerung – statt Wellenfunktionen sollen Zustände nun ausschließlich mit Operatoren beschrieben werden! Hierfür wird ausgehend vom Vakuumzustand $|0\rangle$, wie in Kapitel 4.1 beschrieben, ein genereller Zustand aus einem Ensemble an harmonischen Oszillatoren mit Hilfe der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren formuliert (vgl. (4.9))⁸²:

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_k \frac{1}{\sqrt{n_k!}} (\hat{a}_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle. \quad (4.34)$$

Damit kann der beispielhafte Zustand $|21000\dots\rangle$ als

$$|21000\dots\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2!}} (\hat{a}_1^\dagger)^2 \right) \left(\frac{1}{\sqrt{1!}} (\hat{a}_2^\dagger) \right) |0\rangle \quad (4.35)$$

angeschrieben werden. Hierbei werden jedoch nicht nur Energiequanten in Oszillatoren, sondern auch Teilchen in bestimmten Impulszuständen erzeugt. Dazu soll ein (Zustands-)Erzeugungsoperator $\hat{a}_{p_m}^\dagger$ ein Teilchen im Impulszustand p_m erzeugen. Nun müsste es doch möglich sein, k mit p_m auszutauschen um beschreiben zu können, dass $\hat{a}_{p_m}^\dagger$ ein Teilchen im Zustand $|p_m\rangle$ erzeugt, statt ein Energiequantum im Oszillator k .

Dies ist prinzipiell möglich, jedoch muss vorher überprüft werden, ob damit nicht ein Gesetz verletzt wird, welches zu Beginn des Kapitels aufgestellt wurde. Anders ausgedrückt: es muss untersucht werden, wie diese neue Formulierung mit Bosonen und Fermionen umgeht.

⁸¹vgl. Coleman (2015), S. 18.

⁸²vgl. Coleman (2015), S. 26

Nun gilt es sicherzustellen, dass die neuen (Zustands-)Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die Austauschsymmetrien für idente Teilchen erhalten.⁸³ Dazu werden zunächst der Kommutator des Erzeugungsoperators $\hat{a}_{p_m}^\dagger$ und des Vernichtungsoperators \hat{a}_{p_m} betrachtet.

Dies kann zunächst beispielhaft untersucht werden. Angenommen ein System mit zwei Impulszuständen p_1 und p_2 wird in der Besetzungszahldarstellung als $|n_1 n_2\rangle$ repräsentiert und von Erzeugungsoperatoren aus dem Vakuumzustand hervorgebracht. Die Erzeugungsoperatoren werden als

$$\hat{a}_{p_1}^\dagger |0\rangle = |10\rangle \quad \text{und} \quad \hat{a}_{p_2}^\dagger |0\rangle = |01\rangle \quad (4.36)$$

definiert. Wird nun ein weiteres Teilchen in einem zuvor unbesetzten Zustand erzeugt, folgt

$$\hat{a}_{p_2}^\dagger \hat{a}_{p_1}^\dagger \propto |11\rangle \quad \text{und} \quad \hat{a}_{p_1}^\dagger \hat{a}_{p_2}^\dagger \propto |11\rangle. \quad (4.37)$$

Ob jedoch das Teilchen zuerst in p_1 oder p_2 erzeugt wird, sollte keinen Unterschied machen: schließlich resultiert derselbe Endzustand $|11\rangle$. Demnach gilt

$$\hat{a}_{p_1}^\dagger \hat{a}_{p_2}^\dagger = \lambda \hat{a}_{p_2}^\dagger \hat{a}_{p_1}^\dagger, \quad (4.38)$$

wobei λ eine noch zu bestimmende Variable kennzeichnet. Nun ergeben sich zwei Möglichkeiten: In der einen ist $\lambda = 1$ und in der anderen ist $\lambda = -1$. Ersteres gilt für Bosonen und letzteres für Fermionen.

Für Bosonen mit $\lambda = 1$ ergibt sich

$$\hat{a}_{p_1}^\dagger \hat{a}_{p_2}^\dagger = \hat{a}_{p_2}^\dagger \hat{a}_{p_1}^\dagger. \quad (4.39)$$

Rearrangieren für generalisierte Impulse i und j ergibt den Kommutator

$$[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, \quad (4.40)$$

woraus auch $[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0$ folgt. Um die Analogie zum harmonischen Oszillator komplett hervorzuheben gilt auch

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad (4.41)$$

⁸³vgl. Feynman (1982), S. 167f.

was mit (4.5) übereinstimmt. Somit kann ein genereller Zustand von vielen Teilchen in Impulszuständen als

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_m \frac{1}{\sqrt{n_{p_m}!}} (\hat{a}_{p_m}^\dagger)^{n_{p_m}} |0\rangle. \quad (4.42)$$

angeschrieben werden (vgl. (4.34)). Die Teilchen, die sich damit beschreiben lassen, sind die Bosonen.⁸⁴ Sie verfügen über die symmetrische Austauschrelation

$$\hat{a}_{p_1}^\dagger \hat{a}_{p_2}^\dagger |0\rangle = \lambda \hat{a}_{p_2}^\dagger \hat{a}_{p_1}^\dagger |0\rangle = |1_{p_1}, 1_{p_2}\rangle \quad (4.43)$$

und können dieselben Zustände mehrfach besetzen. Generell gilt

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Für Fermionen mit $\lambda = -1$ ergibt sich ein Antikommutator, der mit geschwungenen Klammern angegeben wird:

$$\{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger + \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i^\dagger = 0. \quad (4.45)$$

Fermionen verfügen über eine *antisymmetrische* Austauschrelation, da $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger = -\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i^\dagger$ gilt.⁸⁵ Wenn $i = j$ gesetzt wird, folgt

$$\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i^\dagger = 0. \quad (4.46)$$

Das bedeutet, dass der Versuch zwei Fermionen im selben Zustand zu erzeugen, kläglich scheitert! Dieses Verhalten ist üblicherweise als das Pauli-Verbot bekannt und besagt, dass ein Zustand nur entweder von einem Fermion besetzt oder komplett unbesetzt sein kann.

Die übrigen Antikommutatoren lauten

$$\begin{aligned} \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} &= 0 \quad \text{bzw.} \\ \{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} &= \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (4.47)$$

⁸⁴vgl. Feynman (1982), S. 174

⁸⁵vgl. Feynman (1982), S. 183f.

und entsprechen ebenso dem Kommutatorverhalten des harmonischen Oszillators in der Form (4.5). Generell gilt für Fermionen

$$\begin{aligned}\hat{c}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= (-1)^{\sum_i} \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle, \\ \hat{c}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle &= (-1)^{\sum_i} \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle,\end{aligned}\tag{4.48}$$

wobei $(-1)^{\sum_i} = (-1)^{(n_1+n_2+\dots+n_{i-1})}$ gilt.

4.4 Wer ist SUSY und wie wandelt sie Fermionen und Bosonen ineinander um? Der harmonische Oszillator in der Supersymmetrie

4.4.1 Fermionen und Bosonen können auch schwingen

In den vorherigen Kapiteln wurde der eindimensionale quantenmechanische harmonische Oszillator für Vielteilchensysteme verallgemeinert und auf seine Eigenschaften hin untersucht. Dabei wurde eines der grundlegendsten Prinzipien der zweiten Quantisierung angewendet: Teilchen werden nicht mehr über ihre Zustände beschrieben, da stattdessen die Teilchenzahl in den möglichen Zuständen untersucht wird. Dies ermöglicht eine effizientere Beschreibung und vor allem erlaubt es Systeme mit variierender Teilchenanzahl, was im älteren Formalismus der Quantenmechanik nicht möglich ist.⁸⁶

Eine Konsequenz dieser Betrachtung ist jedoch die zwingende Unterscheidung zweier Teilchenarten: den Bosonen und Fermionen, welche durch ihre symmetrische (vgl. (4.40) und (4.41)) bzw. ihre anti-symmetrische (vgl. (4.45) und (4.47)) Austauschrelation charakterisiert sind. Das bedeutet, dass sie sich grundsätzlich über das Pauli-Verbot unterscheiden. Keine zwei Fermionen können im selben Zustand existieren, was durch (4.46) ausgedrückt wird, wobei sich beliebig viele Bosonen im selben Zustand befinden dürfen.

Diese Überlegungen lassen sich auch auf einen eindimensionalen harmonischen Oszillator übertragen.⁸⁷ Bei einem *bosonischen* harmonischen Oszillator können sich n

⁸⁶vgl. Coleman (2015), S. 10f.

⁸⁷vgl. Lichtenegger (2015), S. 274

Teilchen im Zustand $|n\rangle$ befinden – bei einem *fermionischen* harmonischen Oszillator muss n jedoch entweder 0 oder 1 sein.

Bei dem bosonischen harmonischen Oszillator erfüllen die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren \hat{a}_b^\dagger und \hat{a}_b gemäß (4.40) und (4.41) die Relationen

$$\begin{aligned} [\hat{a}_b, \hat{a}_b^\dagger] &= 1 \quad \text{und} \\ [\hat{a}_b^\dagger, \hat{a}_b^\dagger] &= [\hat{a}_b, \hat{a}_b] = 0, \end{aligned} \tag{4.49}$$

was ident mit dem Kommutationsverhalten der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren (2.28) ist. Ohne es speziell angeführt zu haben, wurde also bereits in Kapitel 2.2. ein *bosonischer* harmonischer Oszillator behandelt. Demnach lautet der bosonische Hamiltonoperator \hat{H}_b (vgl. (2.29))

$$\hat{H}_b = \hbar \omega_b \left(\hat{a}_b^\dagger \hat{a}_b + \frac{1}{2} \right) \tag{4.50}$$

und verfügt über die Energieeigenwerte E_{n_b}

$$\hat{H}_b |n_b\rangle = E_{n_b} |n_b\rangle \quad \text{mit} \quad E_{n_b} = \hbar \omega_b \left(n_b + \frac{1}{2} \right). \tag{4.51}$$

Bei dem fermionischen harmonischen Oszillator gilt das Pauli-Verbot, das nur die Zustände $|0\rangle$ oder $|1\rangle$ erlaubt. Ein Zweiteilchenzustand $|2\rangle$ muss 0 ergeben. Somit gilt für die fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren \hat{c}_f^\dagger und \hat{c}_f gemäß (4.46)

$$|2\rangle \propto (\hat{c}_f^\dagger)^2 |0\rangle, \tag{4.52}$$

was nur erfüllt ist, falls

$$(\hat{c}_f^\dagger)^2 = \frac{1}{2} \{ \hat{c}_f^\dagger, \hat{c}_f^\dagger \} = 0. \tag{4.53}$$

Somit ergibt sich

$$\begin{aligned} \{ \hat{c}_f, \hat{c}_f^\dagger \} &= 1 \quad \text{und} \\ \{ \hat{c}_f^\dagger, \hat{c}_f^\dagger \} &= \{ \hat{c}_f, \hat{c}_f \} = 0, \end{aligned} \tag{4.54}$$

was mit (4.46) und (4.47) übereinstimmt. Somit lautet der fermionische Hamiltonoperator \hat{H}_f

$$\hat{H}_f = \hbar\omega_f \left(\hat{c}_f^\dagger \hat{c}_f - \frac{1}{2} \right) \quad (4.55)$$

mit den Energieeigenwerten E_{n_f}

$$\hat{H}_f |n_f\rangle = E_{n_f} |n_f\rangle \quad \text{mit} \quad E_{n_f} = \hbar\omega_f \left(n_f - \frac{1}{2} \right), \quad (4.56)$$

wobei $|n_f\rangle$ nur die Werte 0 oder 1 annehmen darf.

4.4.2 Aus Zwei mach Eins: Supersymmetrische Superpartner

Wie kann man nun ein System beschreiben, in welchem sich sowohl Bosonen als auch Fermionen befinden und sogar ineinander umwandeln können? Eine Möglichkeit wäre, den bosonischen und fermionischen harmonischen Oszillator zu einem *supersymmetrischen* harmonischen Oszillator zusammenzufassen.

Dafür wird angenommen, dass bosonischer Oszillator und fermionischer Oszillator nicht miteinander wechselwirken, was bedeutet, dass die fermionischen und bosonischen Operatoren miteinander kommutieren müssen. Der Zustand des gemeinsamen Systems kann mit $|n_b, n_f\rangle$ repräsentiert werden.

Um supersymmetrisch arbeiten zu können, wird ein neuer Operator $\hat{Q} = \hat{a}_b \hat{c}_f^\dagger$ und sein adjungierter Pendant $\hat{Q}^\dagger = \hat{c}_f \hat{a}_b^\dagger$ eingeführt.⁸⁸ Diese wirken auf den supersymmetrischen Zustand $|n_b, n_f\rangle$ folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \hat{Q} |n_b, n_f = 0\rangle &= \hat{a}_b \hat{c}_f^\dagger |n_b, n_f = 0\rangle = \sqrt{n_b} |n_b - 1, n_f = 1\rangle \\ \hat{Q}^\dagger |n_b, n_f = 1\rangle &= \hat{c}_f \hat{a}_b^\dagger |n_b, n_f = 1\rangle = \sqrt{n_b + 1} |n_b + 1, n_f = 0\rangle. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Zu beachten ist, dass die fermionischen Operatoren \hat{c}_f^\dagger und \hat{c}_f nur auf den fermionischen Zustand wirken und den bosonischen unverändert lassen. Ebenso wirken \hat{a}_b^\dagger und \hat{a}_b nur auf den bosonischen Zustand.

⁸⁸vgl. Cooper et al. (2001), S. 31

Der Operator \hat{Q} ändert $n_f = 0$ zu $n_f = 1$ und \hat{Q}^\dagger bewirkt das Gegenteil. Eine interessante Konsequenz ist, dass ein Zustand mit einer geraden Anzahl an Fermionen äquivalent mit einem bosonischen Zustand ist. Anders ausgedrückt verhält sich jeder Zustand, für den $|n_b, n_f \equiv \text{gerade Zahl}\rangle$ gilt, wie ein bosonischer! Analog verhält sich ein Zustand mit einer ungeraden Anzahl an Fermionen und beliebig vielen Bosonen wie ein fermionischer Zustand.⁸⁹

Demnach lässt sich behaupten, dass der Operator \hat{Q} einen bosonischen in einen fermionischen Zustand und der Operator \hat{Q}^\dagger einen fermionischen in einen bosonischen Zustand umwandelt. Eine solche Transformation wird als *supersymmetrische Transformation* bezeichnet, wobei \hat{Q} und \hat{Q}^\dagger die sogenannten *Generatoren* der supersymmetrischen Transformation darstellen.⁹⁰

Damit wurden essentiell ein bosonisches und ein fermionisches System kombiniert! Demnach ist der supersymmetrische Hamiltonoperator \hat{H}_{SUSY} die Summe der Hamiltonoperatoren (4.50) und (4.55) und lautet daher mit $\hbar = 1$

$$\hat{H}_{SUSY} = \hat{H}_b + \hat{H}_f = \omega (\hat{a}_b^\dagger \hat{a}_b + \hat{c}_f^\dagger \hat{c}_f), \quad (4.58)$$

wobei zu beachten ist, dass die Frequenz ω die Funktion einer Kopplungskonstante zwischen den bosonischen und fermionischen Systemen erfüllt und somit $\omega = \omega_b = \omega_f$ gilt.

Die Energieeigenwerte von \hat{H}_{SUSY} sind somit

$$E_{n_b n_f} = \omega (n_b + n_f). \quad (4.59)$$

Das Energiespektrum wird später in diesem Kapitel genauer diskutiert.

Als nächstes ist es jedoch noch wichtig die Symmetrie des kombinierten Systems zu untersuchen. Dafür wird das Kommutationsverhalten des supersymmetrischen Hamiltonoperators \hat{H}_{SUSY} und den Generatoren \hat{Q} und \hat{Q}^\dagger betrachtet. Damit kann

⁸⁹vgl. Cooper et al. (2001), S. 30

⁹⁰vgl. Lichtenegger (2015), S. 275

analysiert werden, ob das kombinierte System invariant gegenüber der supersymmetrischen Transformation ist, wobei zwecks Übersichtlichkeit die Indizes von \hat{a} bzw. \hat{c} weggelassen werden:

$$\begin{aligned}
[\hat{H}_{SUSY}, \hat{Q}] &= \omega [\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{c}^\dagger \hat{c}, \hat{a} \hat{c}^\dagger] \\
&= \omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} + \hat{c}^\dagger \hat{c} \hat{a} \hat{c}^\dagger - \hat{a} \hat{c}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{c}^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{c}) \\
&= \omega (\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a} + \hat{a} (1 - \hat{c} \hat{c}^\dagger) - (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) \hat{a} \hat{c}^\dagger) \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{4.60}$$

Somit wurde gezeigt, dass der supersymmetrische Hamiltonoperator \hat{H}_{SUSY} mit den Generatoren \hat{Q} und \hat{Q}^\dagger kommutiert. Dies ist jedoch nur möglich, wenn die Frequenz des bosonischen und fermionischen Systems ident sind. Eine ähnliche Rechnung zeigt, dass $[\hat{H}_{SUSY}, \hat{Q}^\dagger] = 0$ und somit auch kommutiert, woraus der Schluss gezogen werden kann, dass der supersymmetrische Hamiltonoperator \hat{H}_{SUSY} tatsächlich invariant gegenüber einer supersymmetrischen Transformation ist. Daher lässt sich dieses kombinierte System bedenkenlos als *supersymmetrischer harmonischer Oszillator* bezeichnen.⁹¹

Darüber hinaus gelten für die Generatoren die Antikommutatoren⁹²

$$\begin{aligned}
\{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\} &= \hat{H}_{SUSY} \\
\{\hat{Q}^\dagger, \hat{Q}^\dagger\} &= 0 \\
\{\hat{Q}, \hat{Q}\} &= 0.
\end{aligned} \tag{4.61}$$

Eine Folge dieser Kommutatorrelation ist, dass $[\hat{H}_{SUSY}, \hat{Q}]$ angewendet auf den Zustand $|n_b, n_f = 0\rangle$ zeigt dass $|n_b, n_f = 0\rangle$ und $\hat{Q}|n_b, n_f = 0\rangle$ ident mit $|n_b - 1, n_f = 1\rangle$ sind. Diese Eigenwertgleichung ergibt sogenannte *entartete* Eigenfunktionen, die die *entarteten* Energiezustände des kombinierten Systems beschreiben. *Entartet* heißt in diesem Kontext nichts anderes, als dass für idente Energieeigenwerte je zwei Energiezustände existieren.⁹³ Dies ist nicht verwunderlich, da ein Teilchen sowohl

⁹¹vgl. Cooper et al. (2001), S. 28f.

⁹²vgl. Cooper et al. (2001), S. 18

⁹³vgl. Cooper et al. (2001), S. 18

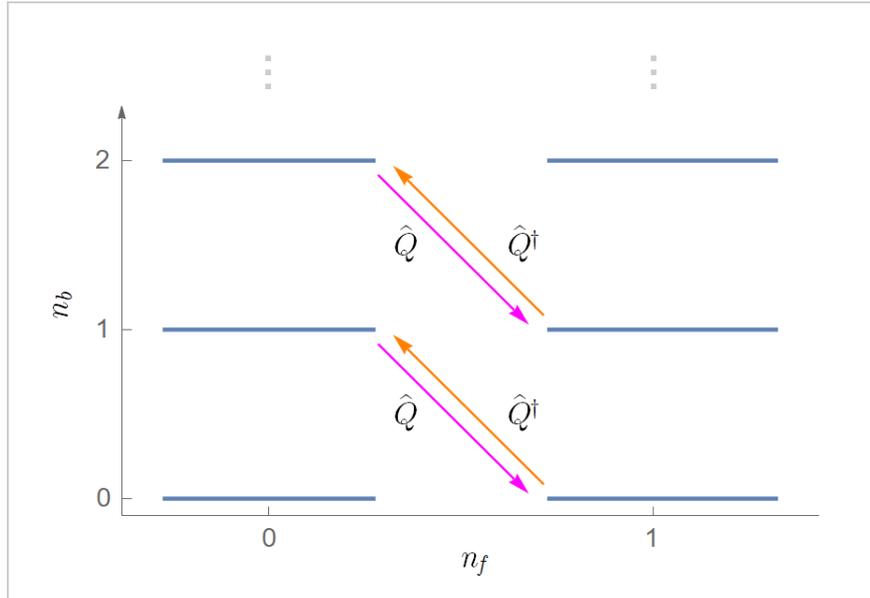


Abbildung 4.2: Energiespektrum des supersymmetrischen harmonischen Oszillators mit den Energien $E_{21} = 3\omega$, $E_{20} = E_{11} = 2\omega$, $E_{10} = E_{01} = \omega$ und $E_0 = 0$. Da $\hat{Q}|n_b, n_f = 0\rangle \propto |n_b - 1, n_f = 1\rangle$ gilt, lässt sich anschaulich zeigen, dass \hat{Q} den bosonischen Zustand um ein Niveau verringert und gleichzeitig mit $n_f = 1$ den Zustand fermionisch werden lässt! Analog kann veranschaulicht werden, dass und $\hat{Q}^\dagger|n_b, n_f = 1\rangle \propto |n_b + 1, n_f = 0\rangle$ einen fermionischen Zustand zu einem bosonischen transformiert und das bosonische Niveau um einen Grad erhöht.

ein diskretes bosonisches als auch fermionisches Energieniveau besetzten kann. Diese Eigenschaft des supersymmetrischen harmonischen Oszillators wurde bereits mit (4.59) angedeutet. Diese Energierelationen sind auf Abb. 4.2 dargestellt.

4.5 Zusammenfassung Teil zwei

- Die erste Quantisierung zeigt, dass sich Teilchen wie Wellen verhalten können. Die zweite Quantisierung hingegen, dass sich Wellen wie Teilchen verhalten. Dazu wird eine neue Notation eingeführt, die als Besetzungszahldarstellung bekannt ist. Mit diesem Formalismus ist es möglich, *identische* Teilchen in möglichen Zuständen zu zählen, statt anzugeben, welche Teilchen in welchem Zustand sind. Dies ermöglicht es, Systeme mit variierender und/oder großer Teilchenzahl zu beschreiben.

- Durch die generalisierte Darstellung eines Ensembles von beliebig vielen quantenmechanischen harmonischen Oszillatoren kann gezeigt werden, dass komplexe gekoppelte Teilchenschwingungen in Festkörpern als Summe entkoppelter harmonischer Oszillationen dargestellt werden können. Diese diskreten Schwingungen des Kristallgitters eines Festkörpers werden als *Phononen* bezeichnet. Da Phononen mit Vielfachen der diskreten Energiequanten von $\hbar\omega_k$ schwingen, macht es Sinn, die quantisierten Gitterschwingungen als Teilchen zu beschreiben. Eine Konsequenz davon ist, dass die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren nun tatsächlich Teilchen – nämlich Phononen – *erzeugen* und *vernichten*!
- Mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die buchstäblich Teilchen erzeugen und vernichten, kann ausgehend von einem Vakuumzustand $|0\rangle$ ein Vielteilchensystem effizient beschrieben werden. Eine Folge davon ist jedoch, dass zwischen Fermionen und Bosonen unterschieden werden muss um die Symmetrie des Vielteilchensystems zu erhalten. Fermionen sind über ihre antisymmetrischen und Bosonen über ihre symmetrischen Kommutationsverhalten charakterisiert.
- Durch die unterschiedlichen Eigenschaften der Fermionen und Bosonen können *bosonische* und *fermionische* harmonische Oszillatoren beschrieben werden. Diese können über die *Generatoren* zu einem kombinierten System gefasst werden, in welchem gleichzeitig Bosonen und Fermionen beschrieben werden. Durch die supersymmetrische Transformation können bosonische und fermionische Zustände ineinander umgewandelt werden.

5 Literaturverzeichnis

- **Aitchison**, Ian J. R. / **Hey**, Anthony J. G. (2013): *Gauge Theories in Particle Physics – A Practical Introduction: From Relativistic Quantum Mechanics to QED*. 4. Edition. Boca Raton London New York (CRC Press).
- **Annett**, James F. (2004): *Superconductivity, Superfluids and Condensates*. Oxford (Oxford University Press).
- **Coleman**, Piers (2015): *Introduction to many body physics*. Cambridge (Cambridge University Press).
- **Cooper**, Fred / **Khare**, Avinash / **Sukhatme**, Uday (2001): *Supersymmetry in Quantum Mechanics*. Singapore (World Scientific).
- **Embacher**, Franz (2010): *Elemente der theoretischen Physik: Band 1, Klassische Mechanik und Spezielle Relativitätstheorie*. Berlin Heidelberg New York (Springer-Verlag).
- **Feynman**, Richard P. (1982): *Statistical Mechanics: A Set Of Lectures*. Reading, Massachusetts (Benjamin/Cummings Publishing).
- **Fließbach**, Torsten (2015): *Mechanik: Lehrbuch zur Theoretischen Physik I*. 7. Auflage. Berlin Heidelberg (Springer-Verlag).
- **Fließbach**, Torsten / **Walliser**, Hans (2012): *Arbeitsbuch zur Theoretischen Physik: Repetitorium und Übungsbuch*. 3. Auflage. Heidelberg (Spektrum Akademischer Verlag).
- **Glimm**, James / **Jaffe**, Arthur (1981): *Quantum Physics: A Functional Integral Point of View*. New York (Springer-Verlag).
- **Lichtenegger**, Klaus (2015): *Schlüsselkonzepte zur Physik: Von den Newton-Axiomen bis zur Hawking-Strahlung*. Berlin Heidelberg (Springer-Verlag).
- **Nolting**, Wolfgang (2009): *Grundkurs Theoretische Physik 5/1: Quantenmechanik – Grundlagen*. 7. Auflage. Berlin Heidelberg (Springer-Verlag).

- **Nolting**, Wolfgang (2014): *Grundkurs Theoretische Physik 2: Analytische Mechanik*. 9. Auflage. Berlin Heidelberg (Springer-Verlag).
- **Powell**, John L. / **Crasmann**, Bernd (1961): *Quantum Mechanics*. Reading Massachusetts (Addison-Wesley Publishing).
- **Rebhan**, Eckhard (2010): *Theoretische Physik: Relativistische Quantenmechanik, Quantenfeldtheorie und Elementarteilchentheorie*. Berlin Heidelberg (Springer-Verlag).
- **Schmüser**, Peter (2012): *Theoretische Physik für Studierende des Lehramts 1: Quantenmechanik*. Berlin Heidelberg (Springer-Verlag).
- **Straumann**, Norbert (2013): *Quantenmechanik: Ein Grundkurs über nichtrelativistische Quantentheorie*. 2. Auflage. Berlin Heidelberg (Springer-Verlag).
- **Weidner**, Richard T. / **Sells**, Robert L. (1973): *Elementary Modern Physics*. Boston (Allyn & Bacon Inc.).

6 Abbildungsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

1.1	Das simple Federpendel	2
1.2	Unterschiedliche Startbedingungen des Federpendels	4
1.3	Energierelationen des klassischen harmonischen Oszillators	7
2.1	Wellenfunktion und Wahrscheinlichkeitsdichte des Grundzustandes . .	24
2.2	Wellenfunktionen angeregter Zustände	26
2.3	Wahrscheinlichkeitsdichten angeregter Zustände	27
3.1	Klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit	39
3.2	Quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit für $n = 0$	40
3.3	Quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit für $n = 10$	41
3.4	Quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit für $n = 100$. . .	42
4.1	Modell einer linearen Atomkette	51
4.2	Energiespektrum des supersymmetrischen harmonischen Oszillators .	66

Abstract

German/Deutsch

Diese Arbeit befasst sich mit dem Modell des harmonischen Oszillators und vergleicht diverse mathematische Formalismen sowie deren physikalische Implikationen. Harmonische Oszillatoren haben als mathematisches Modellsystem eine fundamentale Bedeutung in zahlreichen Teilbereichen der klassischen und modernen Physik. In dieser Arbeit wird eine konsistente und kompakte Abhandlung über harmonische Oszillatoren formuliert, die ausgehend von der Beschreibung eines simplen Federpendels nach newtonscher Mechanik bis hin zur modernen Betrachtung des supersymmetrischen harmonischen Oszillators reicht. Dabei werden insbesondere

- klassische harmonische Schwingungen nach newtonscher und hamiltonscher Mechanik,
- stationäre und zeitabhängige Lösungen der Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators sowohl per Leiteroperatoren als auch über den Potenzreihenansatz nach Sommerfeld,
- klassische Grenzfälle und quasi-klassische kohärente Zustände
- sowie Phononenschwingungen, Mehrteilchensysteme in der Besetzungszahldarstellung und Supersymmetrien behandelt.

Zentral ist dabei die einheitliche Formulierung dieser verschiedenen Systeme, womit ein ausführlicher Vergleich der klassischen und quantenmechanischen Beschreibung des harmonischen Oszillators vollzogen wird. Es wird mit möglichst einfachen mathematischen Methoden stringent gearbeitet, sodass diese Arbeit von Physikstudent*innen früher Semester als zugängliches Kompendium der theoretischen Physik über elementare Unterschiede klassischer und quantenmechanischer Modelle, ausgehend vom harmonischen Oszillator und dem Korrespondenzprinzip, verwendet werden kann.

Abstract

English/Englisch

This diploma thesis deals with the model of the harmonic oscillator and compares various mathematical formalisms and their physical implications. As mathematical model systems, harmonic oscillators are of fundamental importance in numerous areas of classical and modern physics. In this diploma thesis, a consistent and compact discourse on harmonic oscillators is formulated, which ranges from the description of a simple spring pendulum based on Newtonian mechanics to the modern treatment of the supersymmetric harmonic oscillator. This covers in particular

- classical harmonic vibrations according to Newtonian and Hamiltonian mechanics,
- stationary and time-dependent solutions of the Schrödinger equation of the harmonic oscillator both by ladder operators and by the power series method according to Sommerfeld,
- classical limits and quasi-classical coherent states
- as well as phonon vibrations, multi-particle systems in the occupation number representation and supersymmetries.

Central is the uniform formulation of these different systems, for which a detailed comparison of the classical and quantummechanical description of the harmonic oscillator is provided. The simplest possible mathematical methods are stringently used, so that this diploma thesis can be used by physics students in an early stage of their studies as an accessible compendium of theoretical physics about elementary differences between classical and quantummechanical models, based on the harmonic oscillator and the principle of correspondence.