Arbeitsblatt 11

14.01.2019

Der harmonische Oszillator

Dieses Blatt behandelt verschiedene Aspekte des harmonischen Oszillators. Aufgrund seiner analytischen Lösbarkeit und der Tatsache dass alle bindenden Potentiale bei niedrigen Energien mit diesem angenähert werden können ist der quantenmechanische harmonische Oszillator ein sehr wichtiges Utensil in der Quantenmechanik. Während Aufgabe 1 den zweidimensionalen Oszillator behandelt, betrachtet Aufgabe 2 die Eigenzustände des Absteigeoperators, sogenannte kohärente Zustande, die zum Beispiel von einem Laser erzeugt werdem. Aufgabe 3 zeigt, dass auch wenn der harmonische Oszillator meistens nur eine Näherung ist, so beschreibt es häufig die verschiedenen quantenmechanischen Aspekte eines realen Systems, wie ein Kristall, qualitativ erstaunlich gut.

Aufgabe 1: Zwei dimensionaler harmonischer Oszillator (10 Punkte)

Als System betrachten wir einen zweidimensionalen harmonischen Oszillator, wobei dieser zwei verschiedene Frequenzen für die x- bzw. y-Richtung besitzt $\omega_1 \neq \omega_2$. Der Hamiltonoperator $\hat{H}$ ist dann gegeben durch.

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_1^2 \hat{q}_1^2 \right) + \left(\frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_2^2 \hat{q}_2^2 \right) \tag{1}$$

(a) Bestimmen Sie die zugehörigen Eigenwerte und Eigenzustände in Ortsdarstellung von $\hat{H}$ mittels eines Separationsansatzes $\psi(x, y) = \psi(x)\psi(y)$. Die Indizes 1 und 2 beziehen sich dabei jeweils auf die x- bzw. y-Koordinate.

(b) Das Verhältnis der Frequenzen sein nun gegegeben als $\omega_1/\omega_2 = 3/4$. Bestimmen Sie die ersten beiden entarteten Energieniveaus. Was können sie über die Entartung der Energieniveaus aussagen, wenn das Verhältnis der Frequenzen keine rationale Zahl ist?

(c) Geben Sie die Eigenzustände für den Fall $\omega_2 = 0$ an.

(d) Gegeben sei nun ein Teilchen der Masse m in zwei Dimensionen im Potential

$$V(q_1, q_2) = m\omega^2 \left(q_1^2 - q_1 q_2 + q_2^2 \right). \tag{2}$$

Begründen Sie mittels Gl. (1), dass sich dieses Potential ebenfalls mit einem Separationsansatz lösen lässt. Wählen Sie dafür eine geeignete kanonische Transformation $q \to \tilde{q}$, $p \to \tilde{p}$.

Aufgabe 2: Kohärente Zustände (10 Punkte)

In dieser Aufgabe lernen Sie besondere Zustände des harmonischen Oszillators kennen, die sogenannten kohärenten Zustände. Diese sind zunächst definiert als Eigenzustände des Vernichter-Operators $\hat{a}$ des harmonischen Oszillators gemäß

$$\hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle\,, \tag{3}$$

wobei $\alpha \in \mathbb{C}$.

(a) Bestimmen Sie damit die Darstellung der kohärenten Zustände in der Basis der Eigenzustände des harmonischen Oszillators und zeigen Sie, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenzustände im kohärenten Zustand durch die Poissonverteilung

$$P(n) = \frac{|\alpha|^{2n}\mathrm{e}^{-|\alpha|^2}}{n!} \tag{4}$$

gegeben ist.

Der Operator $\hat{D}(\alpha) = \exp\bigl(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}\bigr)$ wird als Generator der kohärenten Zustände bezeichnet, da $|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)\,|0\rangle$ gilt. Dies soll innerhalb der nächsten Teilaufgaben untersucht werden.

(b) Benutzen Sie zunächst die Baker-Campbell-Hausdorff-Formel, um zu zeigen, dass der Generator die Form

$$\hat{D}(\alpha) = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2}\mathrm{e}^{\alpha\hat{a}^\dagger}\mathrm{e}^{-\alpha^*\hat{a}} \tag{5}$$

annimmt.

(c) Beweisen Sie die folgenden Eigenschaften des Generators:

$$\hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{D}^{-1}(\alpha) = \hat{D}(-\alpha), \tag{6}$$

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha) = \hat{a} + \alpha\mathbb{1}, \tag{7}$$

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}^\dagger\hat{D}(\alpha) = \hat{a}^\dagger + \alpha^*\mathbb{1}. \tag{8}$$

(d) Zeigen Sie damit schließlich, dass der Generator die kohärenten Zustände tatsächlich generiert und beweisen Sie damit die Eigenwertgleichung (3). Man kann die kohärenten Zustände also auch über den Generator definieren anstatt über (3).

Die kohärenten Zustände sind vollständig, d.h.

$$\frac{1}{\pi}\int \mathrm{d}^2\alpha\,|\alpha\rangle\langle\alpha| = \mathbb{1}. \tag{9}$$

Da sie ein Kontinuum von Zuständen bilden, es also überabzählbar unendlich viele kohärente Zustände gibt, müssen sie auch übervollständig sein, zwei beliebige kohärenten Zustände sind also nicht orthogonal.

(e) Beweisen Sie, dass die kohärenten Zustände auch übervollständig sind, indem Sie explizit zeigen, dass das Skalarprodukt zweier beliebiger kohärenter Zustände nicht verschwindet.

(f) Die Besonderheit kohärenter Zustände des harmonischen Oszillators besteht in der minimalen Unschärfe von Ort und Impuls. Berechnen Sie die Varianzen von Orts-und Impulsoperator in einem kohärenten Zustand und stellen Sie damit die Unschärferlation auf. Erklären Sie, warum die erhaltene Unschärfe minimal ist.

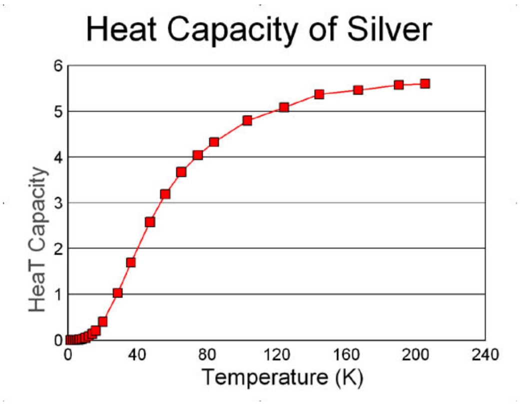

Abbildung 1: Wärmekapazität von Silber.

Aufgabe 3: Spezifische Wärme eines Festkörpers (10 Punkte)

Sei ein Festkörper mit N Atomen gegeben. Dieser sei aufgebaut aus einer einatomigen Kristallstruktur. Klassisch betrachtet liegen die Atome in Ruhe auf den Gitterpunkten, das einer Temperatur $T = 0$ K entspricht. Bei endlichen Temperaturen können die Schwingungen kontinuierlich verschiedene Energien annehmen, die im Mittel der Energie $\bar{E}_{\text{Kl}} = Mk_BT$ entsprechen, wobei k_B die Boltzmann Konstante und M die Zahl der Schwingungsmöglichkeiten ist. Aus der mittleren Energie vermag man die spezifische Wärme des Festkörpers zu bestimmen, $C_v = \partial\bar{E}_{\text{Kl}}/\partial T = Mk_B$. Nach klassischen Gesichtspunkten ist also zu erwarten, dass die Wärmekapazität eines Festkörpers temperaturunabhängig ist. Betrachtet man jedoch die Wärmekapazität experimentell, so sieht man, dass dies nicht allgemein der Fall ist, wie exemplarisch an der Kurve von Silber in Bild 1 zu erkennen ist. Während für hohe Temperaturen die obige Wärmekapazität noch grob die Silberkurve qualitativ beschreibt, so ist sie bei tieferen Temperaturen falsch und unterscheidet sich bei verschwindenden Temperaturen massiv, wo die Experimentelle verschwindet.

Ein naheliegender Grund hierfür ist, dass das Gitter aus Atomen besteht und somit intrinsisch quantenmechanisch ist. Dadurch gibt es eine endliche Nullpunktsenergie sowie quantisierte Schwingungen, auch als Phononen bezeichnet. Ob die Quantenmechanik es vermag die Silberkurve qualitativ zu beschreiben ist die Frage dieser Aufgabe.

Da diese Schwingungen sehr klein sind im Vergleich zur Gitterstruktur - der Festkörper würde sonst seine Struktur verlieren - ist es plausibel zu versuchen die Schwingungen um ihre Ruhelage mittels harmonischer Oszillatoren anzunähern, wodurch die Beschreibung erheblich vereinfacht wird.

(a) Bestimmen Sie die Zahl der Schwingungsmoden M, die ein dreidimensionaler Kristall von N Atomen, bestehend aus einem einatomigen Gitter, besitzt.

Hinweis: Kollektive Bewegungen des Festkörpers zählen nicht als thermische Bewegungen (wieso?). Wie unterscheidet sich daher die Zahl der Schwingungsmöglichkeiten im Vergleich zu unabhängigen Atomen?

Prinzipiell sind die Frequenzen dieser verschiedenen Moden unterschiedlich. Unter Verwendung des Einsteinmodells (1907) jedoch wird angenommen, dass jede Mode mit der Frequenz ω_E schwingt. Dies ist eine stark einschränkende Annahme, jedoch kann man diese versuchen und vergleichen inwiefern dieses Modell die Realität wiederspiegelt. Da die M Moden ungekoppelt sind, können diese quantenmechanisch einzeln betrachtet und auf der Ebene der Erwartungswerte addiert werden (siehe später Mehrteilchensysteme und Tensorprodukte).

Ist der Kristall thermalisiert mit der Temperatur T, so kann der Zustand der Moden beschrieben werden mit dem thermischen Dichteoperator

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{Z_1} e^{-\beta \hat{H}_1}, \tag{10}$$

mit $\beta = 1/(k_B T)$ der inversen Temperatur und k_B der Boltzmannkonstante. Der Hamiltonian einer Mode ist dabei $\hat{H}_1 = \hbar\omega_E \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hbar\omega_E/2$.

(b) Bestimmen Sie die Zustandssumme Z_1 einer Mode und zeigen Sie, dass für die mittlere Energie einer Schwingung die folgende Form gilt

$$\bar{E}_1 = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln(Z_1). \tag{11}$$

Berechnen Sie damit explizit die mittlere Energie $\bar{E}_M$ aller M Moden.

(c) Berechnen Sie die spezifische Wärmekapazität des Festkörpers C_v im quantenmechanischen Fall. Diskutieren Sie die Grenzwerte großer und kleiner Temperaturen von C_v und skizzieren Sie dessen Form in Abhängigkeit der Größe $\tau = k_B T/(\hbar\omega_E)$. Vergleichen Sie dann mit dem experimentellen Fund in Bild 1. Beschreibt das quantenmechanische Modell die Silberkurve qualitativ? Gibt es einen Bereich in dem das klassische Ergebnis mit dem quantenmechanischen (qualitativ) übereinstimmt? Ist die Quantisierung der Moden oder die Nullpunktsenergie primär verantwortlich für das Verhalten im Quantenfall?