VL10: Kapitel 4.1.2: Die Zeitevolution des quantenmechanischen harmonischen Oszillators

Im `week9.pdf` hatten wir das Eigenwertproblem für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator gelöst. Die Funktionen

$$\varphi_n(x) \;=\; \tfrac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}\,\ell}}\, H_n\big(\tfrac{x}{\ell}\big)\, e^{-\frac{x^2}{2\ell^2}} \tag{1}$$

erfüllen die Eigenwertgleichung

$$\hat{H}\varphi_n \;=\; \Big\{ -\tfrac{\hbar^2}{2m}\tfrac{d^2}{dx^2} + \tfrac{D}{2}x^2 \Big\}\psi_n \;=\; E_n\,\varphi_n \tag{2}$$

mit den Energieeigenwerten

$$E_n \;=\; \hbar\omega\big(n + \tfrac{1}{2}\big) \tag{3}$$

Dabei war

$$\omega \;=\; \sqrt{\tfrac{D}{m}} \tag{4}$$

und die Länge ℓ war gegeben durch

$$\ell \;=\; \sqrt{\tfrac{\hbar}{m\omega}} \tag{5}$$

Weiterhin bilden die $\{\varphi_n\}_{n=0}^{\infty}$ eine vollständige Orthonormalbasis von $L^2(\mathbb{R})$. Das heisst, wir haben die Orthonormalitätsrelationen

$$\langle\varphi_m, \varphi_n\rangle \;=\; \int_{\mathbb{R}} \varphi_m(x)\overline{\varphi_n(x)}\,dx \;=\; \delta_{n,m} \tag{6}$$

und es ist so, dass jede Wellenfunktion, jedes $\psi \in L^2(\mathbb{R})$, nach den φ_n's entwickelt werden kann,

$$\psi(x) \;=\; \sum_{n=0}^{\infty}\langle\psi, \varphi_n\rangle\,\varphi_n(x) \tag{7}$$

Da die Zeitevolution der Energieeigenfunktionen φ_n gegeben ist durch

$$\varphi_n(x,t) \;=\; e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,\varphi_n(x) \tag{8}$$

das heisst, die $\varphi_n(x,t)$ sind eine Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung, können wir die Zeitevolution eines beliebigen Anfangszustandes $\psi =: \psi_0$ aus Gleichung (7) sofort angeben:

$$\psi_t(x) \;=\; \sum_{n=0}^{\infty}\langle\psi_0, \varphi_n\rangle\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,\varphi_n(x) \tag{9}$$

Wahl des Anfangszustandes

Der Grundzustand des quantenmechanischen harmonischen Oszillators, das ist die Eigenfunktion zum niedrigsten Energieeigenwert E_0, ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \varphi_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{2^0 0! \sqrt{\pi}\,\ell}}\, H_0\big(\tfrac{x}{\ell}\big)\, e^{-\frac{x^2}{2\ell^2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\ell\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{x^2}{2\ell^2}} \end{aligned} \tag{10}$$

Wir betrachten jetzt den folgenden Anfangszustand[1], der das quantenmechanische Analogon zur klassischen Anfangsbedingung $x_{t=0} = x_0$ und $\dot{x}_{t=0} = 0$ ist:

$$\psi_0(x) \;:=\; \varphi_0(x - x_0) \;=\; \frac{1}{\sqrt{\ell\sqrt{\pi}}}\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\ell^2}} \tag{11}$$

Die Zeitentwicklung ist dann gegeben durch Gleichung (9) und der Aufenthaltsort des quantenmechanischen Teilchens zur Zeit t ist gegeben durch die Grösse

$$\langle x_t \rangle \;:=\; \int_{\mathbb{R}} x\, |\psi_t(x)|^2\, dx \tag{12}$$

Für den harmonischen Oszillator lässt sich diese Grösse noch in analytisch geschlossener Form berechnen, das wollen wir jetzt machen. Das Resultat ist nicht besonders spektakulär, wir werden

$$\langle x_t \rangle \;=\; x_0 \cos(\omega t) \tag{13}$$

bekommen, das stimmt also exakt überein mit dem klassischen Resultat. Das ändert sich dann, wenn wir im nächsten Kapitel einen anharmonischen Oszillator betrachten.

Entwicklung des Anfangszustandes nach Eigenfunktionen

Im `week9.pdf` hatten wir x's und dimensionslose ξ's, der Zusammenhang war gegeben durch

$$\xi \;=\; \tfrac{x}{\ell} \tag{14}$$

und der Zusammenhang zwischen den Eigenfunktionen war

$$\varphi_n(x) \;=\; \tfrac{1}{\sqrt{\ell}}\, h_n\big(\tfrac{x}{\ell}\big) \;=\; \tfrac{1}{\sqrt{\ell}}\, h_n(\xi) \tag{15}$$

mit

$$h_n \;=\; \tfrac{1}{\sqrt{n!}}\, (a^+)^n\, h_0 \tag{16}$$

Die h_n waren Lösung des Eigenwertproblems

$$a^+ a\, h_n \;=\; \tfrac{1}{2}\Big\{ -\tfrac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 - 1 \Big\}\, h_n \;=\; n\, h_n \tag{17}$$

mit den Operatoren

$$\begin{aligned} a &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\big(\xi + \tfrac{d}{d\xi} \big) \\ a^+ &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\big(\xi - \tfrac{d}{d\xi} \big) \end{aligned}$$

[1] kurz zur Notation: der Index 0 an dem ψ bezieht sich auf die Zeit, $t = 0$, der Index 0 an dem φ bezieht sich auf den wievielten Eigenwert, die Eigenfunktion zum 0-ten Eigenwert E_0

Das h_0 war gegeben durch

$$h_0(\xi) \;=\; \tfrac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}\, e^{-\frac{\xi^2}{2}} \tag{18}$$

Den Anfangszustand (11) können wir dann auch folgendermassen schreiben:

$$\psi_0(x) \;=\; \varphi_0(x - x_0) \;=\; \tfrac{1}{\sqrt{\ell}}\, h_0\big(\tfrac{x-x_0}{\ell}\big) \;=\; \tfrac{1}{\sqrt{\ell}}\, h_0(\xi - \xi_0) \tag{19}$$

mit

$$\xi_0 \;:=\; \tfrac{x_0}{\ell}$$

Nun gilt das folgende

Theorem 4.1.2: Die Operatoren a, a^+ und die Funktionen h_0 und h_n seien definiert wie oben. Wir betrachten die Funktion

$$h_0(\xi - \xi_0)$$

mit einem fest gewähltem $\xi_0 \in \mathbb{R}$. Um uns Faktoren von $\sqrt{2}$ sparen zu können, definieren wir noch die Konstante

$$c \;:=\; \tfrac{\xi_0}{\sqrt{2}}$$

Dann gilt:

a) Das $h_0(\xi - \xi_0)$ besitzt die Darstellung

$$h_0(\xi - \xi_0) \;=\; e^{-\frac{c^2}{2}} \,\big(\, e^{ca^+} h_0 \,\big)(\xi) \;\;.$$

b) Das $h_0(\xi - \xi_0)$ besitzt die folgende Entwicklung nach Eigenfunktionen:

$$h_0(\xi - \xi_0) \;=\; e^{-\frac{c^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\, h_n(\xi) \;\;.$$

Zum Beweis dieses Theorems benötigen wir die Baker-Campbell-Hausdorff Formel oder auch BCH-Formel. Da das doch eine ziemlich wichtige Formel ist, schreiben wir sie in ein eigenständiges Theorem:

Theorem 4.1.3 (BCH-Formel): Es seien A und B zwei Operatoren oder Matrizen und der Kommutator $[A, B]$ sei wie üblich definiert durch

$$[A, B] \;:=\; AB \,-\, BA$$

Dann gilt:

a) BCH-Formel, einfache Version: Ist[2]

$$\big[\,A\,,\,[A,B]\big] \;=\; \big[\,B\,,\,[A,B]\big] \;=\; 0$$

dann gilt die Formel

$$e^{A+B} \;=\; e^{A}\,e^{B}\,e^{-\frac{1}{2}[A,B]} \quad .$$

b) Im allgemeinen Fall gilt für hinreichend kleines t

$$e^{tA}\,e^{tB} \;=\; e^{t(A+B)\,+\,\frac{t^2}{2}[A,B]\,+\,\frac{t^3}{12}\big\{\,[\,A\,,[A,B]\,]\,+\,[\,[A,B]\,,B\,]\,\big\}\,+\,O(t^4)} \quad .$$

Beweis: Übungsblatt 10. ■

Beweis Theorem 4.1.2: a) Wir erinnern uns zunächst an die Taylorreihe einer Funktion $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$, sie ist gegeben durch

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) \;+\; f'(x)h \;+\; \tfrac{f''(x)}{2!}\,h^2 \;+\; \tfrac{f'''(x)}{3!}\,h^3 \;+\; \cdots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{1}{n!}\big(h\tfrac{d}{dx}\big)^n f(x) \\ &= \big(e^{h\frac{d}{dx}} f\big)(x) \end{aligned}$$

Also können wir schreiben

$$h_0(\xi-\xi_0) \;=\; \big(e^{-\xi_0\frac{d}{d\xi}}\,h_0\big)(\xi)$$

Aus den Definitionen von a und a^+ folgt

$$\tfrac{d}{d\xi} \;=\; \tfrac{1}{\sqrt{2}}\,(a-a^+) \tag{20}$$

Mit der BCH-Formel, einfache Version,

$$e^{A+B} \;=\; e^{A}\,e^{B}\,e^{-\frac{1}{2}[A,B]}$$

bekommen wir dann, wenn wir die Abkürzung $c := \xi_0/\sqrt{2}$ benutzen,

$$\begin{aligned} e^{-\xi_0\frac{d}{d\xi}} \;=\; e^{\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}(a^+-a)} &= e^{c(a^+-a)} \\ &= e^{c\,a^+}\;e^{-c\,a}\;e^{-\frac{1}{2}[ca^+,-ca]} \\ &= e^{c\,a^+}\;e^{-c\,a}\;e^{+\frac{c^2}{2}\,[a^+,a]} \\ &= e^{-\frac{c^2}{2}}\;e^{c\,a^+}\;e^{-c\,a} \end{aligned}$$

[2]das gilt zum Beispiel immer, wenn $[A,B]=1$ ist wie bei den a und a^+ mit $[a,a^+]=1$

Wegen

$$a^n h_0 \;=\; 0 \qquad \forall n \geq 1$$

haben wir für beliebiges λ

$$e^{\lambda a} h_0 \;=\; h_0$$

so dass wir das $h_0(\xi - \xi_0)$ folgendermassen schreiben können:

$$\begin{aligned} h_0(\xi - \xi_0) &= \big(e^{-\xi_0 \frac{d}{d\xi}} h_0\big)(\xi) \\ &= e^{-\frac{c^2}{2}} \left(e^{c\,a^+}\, e^{-c\,a}\, h_0 \right)(\xi) \\ &= e^{-\frac{c^2}{2}} \left(e^{ca^+} h_0 \right)(\xi) \;\; . \end{aligned}$$

Damit ist der Teil (a) bewiesen. Teil (b) erhalten wir dann durch Entwicklung der e-Funktion in dem e^{ca^+}. Mit der Definition der h_n's aus (16) bekommen wir dann

$$\begin{aligned} h_0(\xi - \xi_0) &\overset{\text{Teil(a)}}{=} e^{-\frac{c^2}{2}} \left(e^{ca^+} h_0 \right)(\xi) \\ &= e^{-\frac{c^2}{2}} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{(ca^+)^n}{n!}\; h_0 \right\}(\xi) \\ &= e^{-\frac{c^2}{2}} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\; \tfrac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}\; h_0 \right\}(\xi) \\ &\overset{(16)}{=} e^{-\frac{c^2}{2}} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\; h_n \right\}(\xi) \\ &= e^{-\frac{c^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\; h_n(\xi) \end{aligned}$$

und das Theorem 4.1.2 ist bewiesen. ■

Zeitevolution von ψ_0

Damit können wir jetzt die Zeitevolution von ψ_0 angeben. Das ψ_0, den Anfangszustand, hatten wir in (11) und (19) definiert durch

$$\psi_0(x) \;=\; \tfrac{1}{\sqrt{\ell}}\, h_0(\xi - \xi_0)$$

Die Entwicklung nach Eigenfunktionen sieht dann also folgendermassen aus:

$$\sqrt{\ell}\,\psi_0(x) \;=\; h_0(\xi - \xi_0) \;=\; e^{-\frac{c^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\; h_n(\xi)$$

so dass die Zeitevolution gegeben ist durch

$$
\begin{aligned}
\sqrt{\ell}\,\psi_t(x) &= e^{-\frac{c^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\; e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\; h_n(\xi) \\
&= e^{-\frac{c^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\; e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t}\; h_n(\xi) \\
&= e^{-i\frac{\omega t}{2}}\; e^{-\frac{c^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{c^n}{\sqrt{n!}}\; e^{-i\omega n t}\; \Big\{ \tfrac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}\; h_0 \Big\}(\xi) \\
&= e^{-i\frac{\omega t}{2}}\; e^{-\frac{c^2}{2}} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(e^{-i\omega t} c a^+)^n}{n!}\; h_0 \right\}(\xi) \\
&= e^{-i\frac{\omega t}{2}}\; e^{-\frac{c^2}{2}} \left(e^{e^{-i\omega t} c a^+} h_0 \right)(\xi) \qquad (21)
\end{aligned}
$$

Jetzt setzen wir

$$
c_t \;:=\; e^{-i\omega t} c
$$

und wenden noch einmal den Teil (a) aus dem Theorem 4.1.2 an. Wir stellen die Formel etwas um und schreiben sie folgendermassen:

$$
\left(e^{c a^+} h_0 \right)(\xi) \;=\; h_0(\xi - \sqrt{2} c)\; e^{+\frac{c^2}{2}}
$$

Damit bekommen wir dann

$$
\left(e^{e^{-i\omega t} c a^+} h_0 \right)(\xi) \;=\; \left(e^{c_t a^+} h_0 \right)(\xi) \;=\; h_0(\xi - \sqrt{2} c_t)\; e^{+\frac{c_t^2}{2}}
$$

Das können wir in (21) einsetzen und erhalten

$$
\begin{aligned}
\sqrt{\ell}\,\psi_t(x) &= e^{-i\frac{\omega t}{2}}\; e^{-\frac{c^2}{2}} \left(e^{c_t a^+} h_0 \right)(\xi) \\
&= e^{-i\frac{\omega t}{2}}\; e^{-\frac{c^2}{2}}\; h_0(\xi - \sqrt{2} c_t)\; e^{+\frac{c_t^2}{2}} \\
&= e^{-i\frac{\omega t}{2}}\; e^{-\frac{\xi_0^2}{4}}\; h_0(\xi - e^{-i\omega t}\xi_0)\; e^{e^{-2i\omega t}\frac{\xi_0^2}{4}} \\
&= e^{-i\frac{\omega t}{2}}\; e^{(e^{-2i\omega t}-1)\frac{\xi_0^2}{4}}\; h_0(\xi - e^{-i\omega t}\xi_0)
\end{aligned}
$$

Damit können wir jetzt die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_t(x)|^2$ berechnen: Wir haben

$$
\begin{aligned}
\ell\,|\psi_t(x)|^2 &= \left| e^{-i\frac{\omega t}{2}}\; e^{(e^{-2i\omega t}-1)\frac{\xi_0^2}{4}}\; h_0(\xi - e^{-i\omega t}\xi_0) \right|^2 \\
&= \left| e^{(e^{-2i\omega t}-1)\frac{\xi_0^2}{4}}\; h_0(\xi - e^{-i\omega t}\xi_0) \right|^2 \\
&= \left| e^{-i\sin(2\omega t)\frac{\xi_0^2}{4}}\; e^{[\cos(2\omega t)-1]\frac{\xi_0^2}{4}}\; h_0(\xi - e^{-i\omega t}\xi_0) \right|^2 \\
&= e^{[\cos(2\omega t)-1]\frac{\xi_0^2}{2}} \times \left| h_0(\xi - e^{-i\omega t}\xi_0) \right|^2
\end{aligned}
$$

Das h_0 war gegeben durch

$$h_0(\xi) \;=\; \tfrac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}\, e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Also bekommen wir

$$\begin{aligned}
\ell\,|\psi_t(x)|^2 \;&=\; e^{[\cos(2\omega t)-1]\frac{\xi_0^2}{2}} \;\times\; \big|\, h_0(\xi - e^{-i\omega t}\xi_0) \,\big|^2 \\
&=\; \tfrac{1}{\sqrt{\pi}}\, e^{[\cos(2\omega t)-1]\frac{\xi_0^2}{2}} \;\times\; \big|\, e^{-\frac{1}{2}(\xi - e^{-i\omega t}\xi_0)^2} \,\big|^2 \\
&=\; \tfrac{1}{\sqrt{\pi}}\, e^{[\cos(2\omega t)-1]\frac{\xi_0^2}{2}} \;\times\; \big|\, e^{-(\,\xi^2 - 2e^{-i\omega t}\xi\xi_0 + e^{-2i\omega t}\xi_0^2\,)} \,\big| \\
&=\; \tfrac{1}{\sqrt{\pi}}\, e^{[\cos(2\omega t)-1]\frac{\xi_0^2}{2}} \;\times\; e^{-\xi^2}\big|\, e^{2e^{-i\omega t}\xi\xi_0} \,\big| \;\times\; \big|\, e^{-e^{-2i\omega t}\xi_0^2} \,\big| \\
&=\; \tfrac{1}{\sqrt{\pi}}\, e^{[\cos(2\omega t)-1]\frac{\xi_0^2}{2}} \;\times\; e^{-\xi^2}\; e^{2\cos(\omega t)\xi\xi_0} \;\times\; e^{-\cos(2\omega t)\,\xi_0^2} \\
&=\; \tfrac{1}{\sqrt{\pi}}\, e^{-[\cos(2\omega t)+1]\frac{\xi_0^2}{2}} \;\times\; e^{-\xi^2}\; e^{2\cos(\omega t)\xi\xi_0}
\end{aligned}$$

Mit der trigonometrischen Identität

$$\cos(2\omega t) + 1 \;=\; 2\cos^2(\omega t)$$

erhalten wir schliesslich

$$\begin{aligned}
\ell\,|\psi_t(x)|^2 \;&=\; \tfrac{1}{\sqrt{\pi}}\, e^{-[\cos(2\omega t)+1]\frac{\xi_0^2}{2}} \;\times\; e^{-\xi^2}\; e^{2\cos(\omega t)\xi\xi_0} \\
&=\; \tfrac{1}{\sqrt{\pi}}\, e^{-\cos^2(\omega t)\,\xi_0^2} \;\times\; e^{-\xi^2}\; e^{2\cos(\omega t)\xi\xi_0} \\
&=\; \tfrac{1}{\sqrt{\pi}}\, e^{-[\,\xi - \cos(\omega t)\xi_0\,]^2}
\end{aligned}$$

und damit, wenn wir die ξ's wieder durch x's ersetzen,

$$|\psi_t(x)|^2 \;=\; \tfrac{1}{\ell\sqrt{\pi}}\, e^{-\frac{[\,x - \cos(\omega t)x_0\,]^2}{\ell^2}}$$

Daraus folgt dann sofort

$$\langle x_t \rangle \;=\; \int_{\mathbb{R}} x\,|\psi_t(x)|^2\,dx \;=\; x_0\,\cos(\omega t)$$

und das ist also exakt identisch mit dem klassischen Resultat. Beim anharmonischen Oszillator werden wir dann sehen, dass es das Phänomen von Collapse und Revivals gibt, und das ist dann ein rein quantenmechanisches Phänomen, man sieht es nicht beim klassischen anharmonischen Oszillator.