

Zur Quantenphysik der linearen Kette

Horst Hübner, Osor, Mai 2006

Einer klassischen Behandlung der Schwingungen einer linearen Kette soll eine quantenmechanische Behandlung mit Hilfe von Quasiteilchen, den *Phononen*, gegenübergestellt werden, die zum Standardrepertoire der Festkörperphysik gehören. Es soll geklärt werden, wo die entscheidenden Unterschiede liegen, wo sie sich auswirken, wo Zustände mit bestimmter Teilchenzahl (Phononenzahl) eine Rolle spielen, und welche merkwürdigen Eigenschaften sie haben. Es soll aber auch gezeigt werden, dass mit Hilfe von kohärenten Zuständen (*mit unbestimmten Phononenzahlen*), wie sie sonst vor allem vom elektromagnetischen Feld (*mit unbestimmten Photonenzahlen*) bekannt sind, eine größtmögliche Annäherung an anschauungsnah klassische akustische Wellen im dreidimensionalen Ortsraum und an klassische Atomschwingungen erreicht werden kann. Kohärente Phononen [9], [10], [11] sind ein weiteres der seltenen Beispiele – neben kohärenten Photonen im Laser und möglicherweise kohärenten Atomen im Atomlaser [7], [8] –, wo in der Quantenphysik dreidimensionale Wellen im Anschauungsraum auftreten, im Unterschied zu Ein-Teilchen-Wellenfunktionen, die in einem abstrakten, evtl. auch dreidimensionalen, Konfigurationsraum existieren. Die Argumentation erfolgt ganz parallel zur Argumentation bei elektromagnetischen Wellen.

Ziel ist es, damit das Verständnis von „Teilchen“ und „Wellen“ in der Quantenphysik zu fördern.

In der Schulphysik werden Schwingungen der linearen Kette gern behandelt, weil dort mit Hilfe von Simulationsprogrammen (z.B. „WELLEN“ vom Autor) alle Erscheinungen von eindimensionalen Wellen untersucht und auf dem Bildschirm anschaulich gemacht werden können. Die klassische Theorie der linearen Kette ist so einfach, dass viele ihrer Eigenheiten sogar quasi auf Schulniveau analytisch studiert werden könnten. Hier soll nun auch eine quantenmechanische Darstellung hinzugefügt werden, wie sie seit Jahrzehnten in jedem Lehrbuch der Festkörperphysik zu finden ist, allerdings mit einer Erweiterung, über die erst seit ca. 15 Jahren diskutiert wird, die aber soweit Fortschritte gemacht hat, dass man heutzutage sogar von einer *Phononen-Optik* spricht und dabei Phononen-Linsen, -Spiegel und -Mikroskope entwickelt, mit denen man z.B. interne Kristalldefekte visualisieren kann, aber eben auch eine Phononen-Quanten-Optik, die allerdings noch in den Kinderschuhen steckt. Dabei werden Erkenntnisse der letzten Jahrzehnte zur *Photonen-Quanten-Optik* mit Licht übertragen. Die Anfangsgründe werden hier dargestellt, weil der Autor glaubt, dass mit dem Weg von Phononen zu Photonen Grundlagen der Quantentheorie leichter verstanden werden können. Im Teil über kohärente Phononen folgt der Autor dabei weitgehend einer entsprechenden Darstellung für Licht von R. Loudon in seinem Buch „The quantum theory of light“ [3].

1. Transversale akustische Schwingungen der linearen Kette, klassisch untersucht

Betrachten Sie folgendes Modell: N Atome gleicher Masse m seien durch elastische Federn mit der Federhärte f verbunden. Sie sollen ausschließlich transversale Schwingungen ausführen (oder ausschließlich longitudinale). Ein Atom im Inneren der Kette erfahre zwei Kräfte durch die nächsten Nachbarn, die von ihrem Abstand zu den nächsten Nachbarn abhängt. Kräfte zu weiteren Nachbarn, anharmonische Kräfte und Effekte, die mit der Querauslenkung der Atome (statt der in Rechnung

gesetzten Abstandsänderungen in Längsrichtungen) sollen vernachlässigt werden, ebenso Randeffekte. Aus dem Kraftansatz für das Atom mit der Nummer r

$$F_r = f \cdot [(q_{r-1} - q_r) + (q_{r+1} - q_r)] = f \cdot [q_{r-1} + q_{r+1} - 2 \cdot q_r]$$

ergibt sich eine potentielle Energie für die gesamte Kette, wie man durch Differenzieren leicht nachweisen kann:

$$U = \frac{1}{2} f \sum_r [q_{r-1} - q_r]^2$$

Die Summe erfolgt über alle Atome mit den Nummern r .

Es ergibt sich ein System von gekoppelten Bewegungsgleichungen

$$m \ddot{q}_r = f \cdot [q_{r-1} + q_{r+1} - 2 \cdot q_r]$$

mit der zweiten Zeit-Ableitung der Auslenkung, also \ddot{q}_r . Sie gehen typischerweise in Simulationsprogramme ein und werden dort numerisch gelöst. Für die analytische Behandlung werden hier Randeffekte weggelassen und „periodische Randbedingungen“ eingeführt, d.h. man stellt sich vor, dass sich an die Kette der Länge N an beiden Seiten gleichartige Ketten anschließen usw., bzw. dass „sich die Schlange in den Schwanz beißt“.

Zu einer analytischen Behandlung werden *Eigenschwingungen* (Normalschwingungen) gesucht, d.h. Schwingungen, bei denen alle Atome mit der gleichen (Kreis-)Frequenz ω schwingen. Das führt auf den Ansatz $q_r = q_{r,0} \cdot e^{i\omega t}$ und die Bewegungsgleichungen werden auf ein System von algebraischen Gleichungen zurückgeführt:

$$-m \omega^2 q_{r,0} = f \cdot [q_{r-1,0} + q_{r+1,0} - 2 \cdot q_{r,0}]$$

Ein anderer Lösungsweg geht von der Energiefunktion aus:

$$H = \frac{1}{2} m \sum_r \dot{q}_r^2 + \frac{1}{2} f \sum_r [q_{r-1} - q_r]^2$$

Die Summe musste eingefügt werden, weil alle Atome mit einander verkoppelt sind, sodass die Energie eines Teilchens allein sicher keine Erhaltungsgröße ist. Bei der tatsächlich Energieerhaltung für H dagegen führt Zeitableitung wieder auf die Bewegungsgleichungen. Man sieht, dass die potentielle Energie in den „Federn“ zwischen zwei benachbarten Atomen steckt.

Um die Verkopplungen loszuwerden, wird für die Eigenschwingungen (Normalmoden) eine Fouriertransformation durchgeführt:

$$q_r = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k [Q_k e^{i(kr-\omega t)} + Q_k^* e^{-i(kr-\omega t)}] \quad (*)$$

mit evtl. komplexen Amplituden Q_k und ihren konjugiert komplexen Q_k^* . Hier läuft die Summe über die Wellenzahlen k der zugehörigen „Phononen-Moden“. Eigentlich müsste im Exponenten $k = \pm 2 \cdot \pi / \lambda$ stehen mit der Wellenlänge λ und sein Faktor $r \cdot d$ (n und r natürliche Zahlen), wenn d der Abstand zweier benachbarter Atome ist. Die Wellenlänge λ , die in die Kette von N Atomen eingepasst werden kann, müsste n/d sein ($n = 0, 1, 2, \dots$). Zur Vereinfachung der Schreibweise, weil ja immer das Produkt auftritt, werden die d -abhängigen Faktoren in beiden Fällen weggelassen. Die Atomnummer r läuft dabei von 1 bis N (N soll hier gerade sein). Dann ergeben sich die möglichen

Werte von k aus der Bedingung

$$e^{ikN} = 1 \quad (\text{eine Folge der periodischen Randbedingungen})$$

mit der Lösung $k = \pm 2\pi n/N$ $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{1}{2}(N-1), \frac{1}{2}N, -\frac{1}{2}N$ würden zur gleichen Schwingung führen. Sie werden nur einmal gezählt.

Dem entspricht (außer für $k = 0$) in umgekehrter Reihenfolge $\lambda = N \cdot d, N \cdot d/2, N \cdot d/3, \dots, N \cdot d/N$.

Man kann sich leicht davon überzeugen, dass in diesem Ansatz bekannte Schwingungsformen enthalten sind. Wenn die Amplituden Q_k und Q_k^* zueinander komplex konjugiert sind mit:

$$Q_k = |Q_k| e^{i\theta} \quad \text{und} \quad Q_k^* = |Q_k| e^{-i\theta} \quad \text{mit einem beliebigen Phasenfaktor } e^{i\theta},$$

gilt: $q_r = 1/\sqrt{N} \sum_k |Q_k| \cos(kr - \omega t + \theta)$. Eine Mode davon könnte also einer cos-Welle entsprechen, wenn $\theta = 0$, oder einer sin-Welle, wenn $\theta = -\pi/2$. Würde man in der Summe einen k -Wert mit seinem negativen Wert ($-k$) verbinden, käme man zu einer stehenden Welle; die Summe müsste dann auf nicht negative k beschränkt werden. Der Ansatz genügt also allen Kenntnissen über mögliche Schwingungsformen. Er bewährt sich beim technischen Problem, die einzelnen Atome rechnerisch zu entkoppeln.

Es gilt dann

$$q_r = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k [Q_k e^{i(kr - \omega t)} + Q_k^* e^{-i(kr - \omega t)}]$$

$$q_{r+1} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k [Q_k e^{i(kr - \omega t)} e^{ik} + Q_k^* e^{-i(kr - \omega t)} e^{-ik}]$$

$$q_{r-1} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k [Q_k e^{i(kr - \omega t)} e^{-ik} + Q_k^* e^{-i(kr - \omega t)} e^{ik}]$$

Setzt man in die Bewegungsgleichung ein, dann kann auf beiden Seiten den Faktor $1/\sqrt{N}$ wegkürzen und man erhält:

$$\begin{aligned} & -m \omega^2 \sum_k [Q_k e^{i(kr - \omega t)} + Q_k^* e^{-i(kr - \omega t)}] \\ & = f \sum_k \{ [Q_k e^{i(kr - \omega t)} e^{ik} + Q_k^* e^{-i(kr - \omega t)} e^{-ik}] + [Q_k e^{i(kr - \omega t)} e^{-ik} + Q_k^* e^{-i(kr - \omega t)} e^{ik}] \\ & - 2 \sum_k [Q_k e^{i(kr - \omega t)} + Q_k^* e^{-i(kr - \omega t)}] \} \\ & -m \omega^2 \sum_k [Q_k e^{i(kr - \omega t)} + Q_k^* e^{-i(kr - \omega t)}] \\ & = f \sum_k \{ Q_k e^{i(kr - \omega t)} (e^{ik} + e^{-ik} - 2) + Q_k^* e^{-i(kr - \omega t)} (e^{ik} + e^{-ik} - 2) \} \end{aligned}$$

Die Gleichung zerfällt in zwei Teilgleichungen, weil sie für beliebige Zeiten gilt:

$$-m \omega^2 \sum_k [Q_k e^{i(kr - \omega t)}] = f \sum_k \{ Q_k e^{i(kr - \omega t)} (e^{ik} + e^{-ik} - 2) \}$$

$$-m \omega^2 \sum_k [Q_k^* e^{-i(kr - \omega t)}] = f \sum_k \{ Q_k^* e^{-i(kr - \omega t)} (e^{ik} + e^{-ik} - 2) \}$$

Sie führen beide zur Identifizierung der Eigenfrequenz ω in Abhängigkeit von der Wellenzahl k (alle Summen laufen hier über k):

$$\omega = \sqrt{2f/m (1 - \cos k)} = 2 \sqrt{f/m} \sin(k/2)$$

Da ω von k abhängt, schreiben wir künftig meistens ω_k . Die Gleichung wird durch die sog. **Dispersionskurve** für akustische Phononen dargestellt. Für kleine k wächst ω_k annähernd linear an ($\sin k/2 = k/2 + \dots$), für $k \Rightarrow \pm\pi$ strebt ω_k gegen den Maximalwert $2 \sqrt{f/m}$. Die Ableitung von ω_k nach k , $v = \partial\omega_k / \partial k$, stellt die Ausbreitungsgeschwindigkeit (Gruppengeschwindigkeit) der Schallwellen in der linearen Kette dar. Diese ist offenbar für kleine k konstant (also gibt es hier keine Dispersion). Das ist wie bei einem kontinuierlichen Medium, wenn die Welle nichts von der diskreten Struktur der Kette „bemerkt“: Die Wellenlänge λ ist dann in der Größenordnung von Nd ; die Welle „bemerkt“ nichts von den diskreten Gitterabständen d . Das wirkt sich bei Wellenpaketen aus: Jeder Frequenz-Anteil zum Paket breitet sich mit der gleichen Geschwindigkeit aus, die Form des Wellenpakets bleibt unverändert. Für $k \Rightarrow \pm\pi$ dagegen strebt die Ausbreitungsgeschwindigkeit gegen 0. Die zugehörige Wellenlänge λ strebt gegen den Gitterabstand d . Solche Wellen können offenbar in die lineare Kette nicht eindringen und sich nicht in ihr ausbreiten. Hier liegt „maximale“ Dispersion vor, schon bei etwas kleineren k -Werten (größeren Wellenlängen) ändert sich die Ausbreitungsgeschwindigkeit stark, Wellenpakete ändern ihre Form. Offenbar erhält man alle möglichen Eigenschwingungen, wenn k einen der erlaubten Werte aus dem Bereich $-\pi/d < k \leq \pi/d$ annimmt (wobei jetzt wieder der Faktor $1/d$ eingefügt wurde). In der Festkörperphysik spricht man von Beschränkung auf die erste Brillouin-Zone.

Die Q_k 's werden durch die Anfangsbedingungen festgelegt. Um beliebige Schwingungsformen zu erhalten, z.B. Wellenpakete, müssten lineare Überlagerungen der Normalschwingungen durchgeführt werden, d.h. die Q_k 's in Gleichung (*) geeignet angepasst werden. Damit ist das klassische Problem der akustischen Schwingungen der linearen Kette im Prinzip gelöst. Die Ergebnisse können mit einem Simulationsprogramm wie WELLEN (z.B. vom Autor) überprüft werden. Insbesondere ergibt sich dort, dass bei Anregung mit der Frequenz $\omega_{\max} = \sqrt{2f/m}$ durch periodisches Auf- und Abbewegen des Kettenanfangs eine Welle nicht eindringen kann.

2. Quantisierung der Eigenschwingungen

Will man ein Problem quantisieren, muss man Auslenkung wie Impulse als Operatoren auffassen und die Nicht-Gleichzeitige-Messbarkeit durch eine Vertauschungsrelation ins Spiel bringen. Zuvor wird eine Transformation zu neuen Operator-Variablen a_k und a_k^+ durchgeführt: Schreiben wir zunächst wegen

$$q_r = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k [Q_k e^{i(kr-\omega t)} + Q_k^* e^{-i(kr-\omega t)}] = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k [Q_k(t) e^{ikr}]$$

Dabei wurde der Exponentialfaktor $e^{-i\omega t}$ in $Q_k(t)$ absorbiert und angenommen, dass $Q_{-k}(t) = Q_k^*(t)$

Analog lässt sich ein kanonischer Impuls $p_r = m \cdot \dot{q}_r = m / \sqrt{N} \sum_k [\dot{Q}_k(t) e^{ikr}] = 1/\sqrt{N} \sum_k [P_{-k} e^{ikr}]$ definieren, wobei also $P_{-k}(t) = m \cdot \dot{Q}_k^*(t)$ (der Punkt kennzeichnet die Zeitableitung) und $P_{-k}(t) = P_k^+(t)$. Dass das die richtige Wahl des kanonischen Impulses war, ergibt sich aus dem Hamiltonoperator bzw. der Lagrangefunktion (siehe Anhang I).

Damit ergibt sich jedenfalls der Hamiltonoperator

$$H = \sum_k \{ (2m)^{-1} P_k P_{-k} + \frac{1}{2} m \omega_k^2 Q_{-k} Q_k \}$$

mit der Summe über alle positiven und negativen k . Der Leser erkennt darin fast die Energiebeziehung für harmonische Oszillatoren mit dem Schönheitsfehler, dass ausschließlich Operatorprodukte mit gemischten k -Indizes auftreten. Das hängt eben damit zusammen, dass man für stehende Wellen gegenläufige fortschreitende Wellen kombinieren muss. (Man kann auch zeigen, dass die P 's und Q 's keine hermiteschen Operatoren sind, also nicht Messgrößen entsprechen.) Durch eine trickreiche Transformation wird dieser Makel im Folgenden beseitigt.

Der Übergang zur Quantenmechanik erfolgt jetzt dadurch, dass die P 's und Q 's als Operatoren aufgefasst werden, die nicht gleichzeitig bestimmte Messwerte besitzen. Dieses Faktum wird durch die Vertauschungsrelationen

$$[P_k, Q_{k'}] = P_k \cdot Q_{k'} - Q_{k'} \cdot P_k = i \hbar \delta_{kk'} \quad (**)$$

$$[Q_k, Q_{k'}] = Q_k \cdot Q_{k'} - Q_{k'} \cdot Q_k = 0$$

$$[P_k, P_{k'}] = P_k \cdot P_{k'} - P_{k'} \cdot P_k = 0$$

berücksichtigt. Wir definieren dann, um von den gemischten Produkten wegzukommen (die a 's verbinden sozusagen Q 's und P 's mit unterschiedlichen Wellenzahlen):

$$a_k^+ = (2\hbar\omega m)^{-1/2} [m \cdot \omega \cdot Q_{-k} - i P_k]$$

$$a_k = (2\hbar\omega m)^{-1/2} [m \cdot \omega \cdot Q_k + i P_{-k}]$$

und es ergibt sich:

$$a_{-k}^+ = (2\hbar\omega m)^{-1/2} [m \cdot \omega \cdot Q_k - i P_{-k}]$$

$$a_{-k} = (2\hbar\omega m)^{-1/2} [m \cdot \omega \cdot Q_{-k} + i P_k]$$

Die a 's haben von den Operatoren Q und P noch eine implizite Zeitabhängigkeit geerbt. Addieren wir die zweite und die dritte Gleichung, finden wir:

$$a_k + a_{-k}^+ = (2\hbar\omega m)^{-1/2} 2 \cdot m \cdot \omega \cdot Q_k$$

oder

$$Q_k = (\hbar/2\omega m)^{1/2} (a_k + a_{-k}^+)$$

Subtrahieren wir von der vierten die erste Gleichung, erhalten wir:

$$a_{-k} - a_k^+ = (2\hbar\omega m)^{-1/2} 2 i P_k$$

oder:

$$P_k = -i (\hbar\omega m/2)^{1/2} (a_{-k} - a_k^+)$$

Die kanonischen Variablen Q_k und P_k lassen sich damit durch die neuen Operatoren a_k und a_k^+ ausdrücken. Leider treten die Operatoren a_{-k} und a_k^+ immer mit unterschiedlichen Wellenzahlen auf. Dennoch haben diese Operatoren besondere Vorteile, wie Sie gleich einsehen werden. Im Folgen-

den soll erstens der Hamiltonoperator durch a_{-k} und a_k^+ ausgedrückt werden. Zweitens soll eine Vertauschungsrelation für a_{-k} und a_k^+ gewonnen werden. Es gilt:

$$\begin{aligned} a_k^+ \cdot a_{-k} &= (2\hbar\omega)^{-1/2} [m \cdot \omega \cdot Q_{-k} - i P_{-k}] (2\hbar\omega)^{-1/2} [m \cdot \omega \cdot Q_k + i P_{-k}] \\ &= (2\hbar\omega)^{-1} [m^2 \cdot \omega^2 Q_{-k} Q_k + m \cdot \omega \cdot Q_{-k} i P_{-k} - i P_{-k} m \cdot \omega \cdot Q_k + P_{-k} P_{-k}] \\ &= (2\hbar\omega)^{-1} \{P_{-k} P_{-k} + m^2 \cdot \omega^2 Q_{-k} Q_k + i \cdot m \cdot \omega [Q_{-k} P_{-k} - P_{-k} Q_k]\} \end{aligned}$$

und entsprechend:

$$\begin{aligned} a_{-k} \cdot a_k^+ &= (2\hbar\omega)^{-1/2} (2\hbar\omega)^{-1/2} [m \cdot \omega \cdot Q_k + i P_{-k}] [m \cdot \omega \cdot Q_{-k} - i P_{-k}] \\ &= (2\hbar\omega)^{-1} [m^2 \cdot \omega^2 Q_k Q_{-k} + m \cdot \omega i P_{-k} Q_{-k} - i Q_k P_{-k} m \cdot \omega + P_{-k} P_{-k}] \\ &= (2\hbar\omega)^{-1} \{P_{-k} P_{-k} + m^2 \cdot \omega^2 Q_k Q_{-k} + i \cdot m \cdot \omega [P_{-k} Q_{-k} - Q_k P_{-k}]\} \end{aligned}$$

also:

$$\begin{aligned} \sum_k [a_{-k} \cdot a_k^+ - a_k^+ \cdot a_{-k}] &= \sum_k (2\hbar\omega)^{-1} i \cdot m \cdot \omega [P_{-k} Q_{-k} - Q_k P_{-k} - Q_{-k} P_{-k} + P_{-k} Q_k] \\ &= i \frac{1}{2\hbar} \sum_k [2 P_{-k} Q_k - 2 Q_k P_{-k}] \end{aligned}$$

In der Summe über k ließen sich einige Glieder umordnen, so dass gleichartige Indizes in der Differenz entstanden.

Wegen $[P_{-k} Q_k - Q_k P_{-k}] = [P_{-k}, Q_k] = i \hbar$ ergibt sich also $\sum_k [a_{-k} \cdot a_k^+ - a_k^+ \cdot a_{-k}] = -N$ und für jeden der einzelnen Summanden

$$[a_{-k} \cdot a_k^+ - a_k^+ \cdot a_{-k}] = -1 \text{ bzw. für den Kommutator}$$

$$[a_k^+, a_{-k}] = 1$$

verallgemeinert aus (**): $[a_k^+, a_{k'}] = \delta_{kk'}$
und auch

$$\begin{aligned} \sum_k [a_k^+ \cdot a_{-k}] &= \sum_k (2\hbar\omega)^{-1} \{P_{-k} P_{-k} + m^2 \cdot \omega^2 Q_{-k} Q_k + i \cdot m \cdot \omega [Q_{-k} P_{-k} - P_{-k} Q_k]\} \\ &= 1/2 \hbar \omega H + \sum_k 1/2 \end{aligned}$$

also
$$H = \sum_k \hbar \omega_k [a_k^+ \cdot a_{-k} + 1/2]$$

Der Hamiltonoperator entspricht jetzt wirklich dem unabhängiger Oszillatoren mit unterschiedlichen Wellenzahlen k (Summe über alle k). Hier kommen nur Operatoren mit gleichen Wellenzahlen k vor.

Die Eigenschaften der Operatoren a_k^+ und a_{-k} sollen jetzt untersucht werden.

Es sei $|n, k\rangle$ ein Eigenzustand zum Hamiltonoperator mit Wellenzahl k und einem weiteren Parameter n , der sich als Teilchenzahl herausstellen wird.

Es gilt also

$$H |n, k'\rangle = E_n |n, k'\rangle$$

Beide Seiten werden jetzt von links mit dem Operator $a_{k'}^+$ multipliziert. Es ergibt sich mit (*):

$$\sum_k \hbar\omega_k [a_{k'}^+ a_{k'}^+ \cdot a_k + \frac{1}{2} a_{k'}^+] |n, k'\rangle = E_n a_{k'}^+ |n, k'\rangle$$

bzw. nach Umordnung mit

$$\begin{aligned} a_{k'}^+ a_{k'}^+ \cdot a_k &= a_{k'}^+ a_{k'}^+ \cdot a_k = a_{k'}^+ \cdot a_k a_{k'}^+ - \delta_{kk'} a_{k'}^+ \\ \sum_k \hbar\omega_k [a_{k'}^+ \cdot a_k a_{k'}^+ - \frac{1}{2}] a_{k'}^+ |n, k'\rangle &= [E_n + \hbar\omega_{k'}] a_{k'}^+ |n, k'\rangle \end{aligned}$$

$a_{k'}^+ |n, k'\rangle$ ist also wieder ein Eigenzustand zum Hamiltonoperator mit einer um $\hbar\omega_{k'}$ gegenüber E_n erhöhten Energie. Wenn nun definiert wird:

$|n+1, k'\rangle = C a_{k'}^+ |n, k'\rangle$ mit einem evtl. komplexen Normierungsfaktor C , und $E_{n+1} = E_n + \hbar\omega_{k'}$, dann finden wir eine einfache Deutung: n kennzeichnet die Anzahl der Phononen mit der Wellenzahl k' . Der Wellenzahl entspricht ein „Quasiimpuls“ $\hbar k'$ in Ausbreitungsrichtung des Phonons. Im Zustand $|n+1, k'\rangle$ ist ein Phonon mehr vorhanden als im Zustand $|n, k'\rangle$. Dem entspricht, dass seine Energie um $\hbar\omega_{k'}$ größer ist als die von Zustand $|n, k'\rangle$; $\hbar\omega_{k'}$ ist gerade die Energie des zusätzlichen Phonons. Im Zustand $|n, k'\rangle$ haben alle n Phononen die gleiche Energie $\hbar\omega_{k'}$. $a_{k'}^+$ wird als „**Erzeugungoperator**“ aufgefasst, der dem Zustand $|n, k'\rangle$ ein weiteres Phonon hinzufügt. Durch mehrfaches Anwenden des Erzeugungoperators kann man Zustände mit beliebigen Phononen-Zahlen erzeugen.

Ganz entsprechend zeigt man, dass $a_k |n, k'\rangle$ ein Eigenzustand des Hamiltonoperators ist mit dem Energieeigenwert $E_n - \hbar\omega_{k'}$. Der neue Eigenzustand wird $|n-1, k'\rangle$ genannt. Er enthält nach der gleichen Deutung ein Phonon weniger als der Zustand $|n, k'\rangle$. a_k wird als „**Vernichtungsoperator**“ bezeichnet.

Wendet man mehrmals hintereinander auf den Zustand $|n, k\rangle$ den Vernichtungsoperator a_k an, kommt man schließlich bei einem Zustand ohne ein Photon an: $|0, k\rangle$. Er wird als der „**Grundzustand mit der Energie E_0** “ bezeichnet. Es gilt $a_k |0, k\rangle = 0$ im Einklang mit der Tatsache, dass Zustände mit noch kleinerer Energie oder mit „negativer Phononenzahl“ nicht existieren. Damit kann man die Eigenwertgleichung für E_0 lösen:

$$H |0, k\rangle = \sum_k \hbar\omega_k [a_k^+ \cdot a_k + \frac{1}{2}] |0, k\rangle = E_0 |0, k\rangle,$$

also $E_0 = \frac{1}{2} \sum \hbar\omega_k$. Da es nur endlich viele k -Werte in der linearen Kette gibt, ist die **Grundzustandsenergie endlich**, ganz anders als bei Photonen mit einer kontinuierlichen Verteilung der k -Werte. Die Grundzustands-Energie wird auch manchmal Vakuum-Energie genannt, weil sie dem Phononen-Vakuum entspricht, also dem Zustand ohne Photonen. Sie ist ein rein quantenmechanischer Effekt und kommt in einer klassischen Behandlung nicht vor. Für die meisten physikalischen Anwendungen spielt sie keine Rolle. Sie ist aber in der Bewegung sichtbar und hat einige wichtige physikalische Auswirkungen bei niederen Temperaturen.

Die Zustände $|n, k\rangle$ sollen jetzt normiert werden, d.h. für die Norm soll gelten: $\langle n, k | n, k\rangle = 1$. Zur Normierung wurde der komplexe Faktor C_n schon eingeführt mit:

$$\begin{aligned} C_n |n-1, k\rangle &= a_k |n, k\rangle, \text{ und damit } \langle n-1, k | C_n^* = \langle n, k | a_k^+ , \text{ also} \\ \langle n-1, k | C_n^* C_n |n-1, k\rangle &= \langle n, k | a_k^+ \cdot a_k |n, k\rangle = \langle n, k | n, k\rangle = n. \end{aligned}$$

Bis auf einen eventuellen komplexen Phasenfaktor vom Betrag 1 wird also gelten: $|C_n| = n^{1/2}$, und als Folge:

$$a_k |n, k\rangle = n^{1/2} |n-1, k\rangle \text{ und ähnlich: } a_k^+ |n, k\rangle = (n+1)^{1/2} |n+1, k\rangle$$

$N_k = a_k^+ \cdot a_k$ kommt im Hamilton-Operator vor und wird als „**Teilchenzahl-Operator**“ bezeichnet. Wir wollen seine Eigenwerte bestimmen.

$$N_k |n, k\rangle = a_k^+ \cdot a_k |n, k\rangle = a_k^+ n^{1/2} |n-1, k\rangle = n^{1/2} n^{1/2} |n, k\rangle = n |n, k\rangle \quad n \in \mathbb{N}$$

Die Eigenwerte sind also genau die Phononen-Zahlen n . Deshalb also der Name Teilchenzahl-Operator. Natürlich hängt die jeweilige Teilchenzahl n auch von der Wellenzahl k des Phonons ab. Der Index k in n_k wurde zur Vereinfachung weggelassen, ebenso ein eventueller Phasenfaktor vom Betrag 1. Der Hamilton- und der Teilchenzahl-Operator sind vertauschbar, d.h. Energie-Eigenzustände sind gleichzeitig Teilchenzahl-Eigenzustände, Energie und Teilchenzahl sind gleichzeitig bestimmt, es gibt keine Energie-Eigenzustände, die nicht gleichzeitig zu einer bestimmten Phononenzahl gehören. Überall da, wo man Energie-Eigenzustände braucht, z.B. in allen thermodynamischen Größen, kann man diese durch Zustände bestimmter Phononenzahl ausdrücken.

Wegen der Vertauschungsrelation $[a_k^+, a_k] = \delta_{kk}$ sind die Phononen (wie auch Photonen) Bosonen. Sie besetzen mit Vorliebe denselben Zustand, was man auch der zuständigen **Bose-Einstein-Statistik** entnehmen kann. Bei thermodynamischen Rechnungen im thermodynamischen Gleichgewicht braucht man häufig den Besetzungszahlen-Faktor (mittlere Anzahl der Phononen in einer Phononenmode mit Wellenzahl k):

$$\langle n_k \rangle = [\exp(\hbar\omega_k/k_B T) - 1]^{-1}$$

Dabei ist k_B die Boltzmann-Konstante und T die absolute Temperatur. Ganz Entsprechendes gilt für Photonen.

3. Wie sehen Phononen in Teilchen-Zahl-Zuständen aus? [3]

Üblicherweise erhält man messbare Größen, wenn man von hermiteschen Operatoren Erwartungswerte bzgl. der beteiligten Zustände bestimmt. In unserem Fall heißt das vor allem, dass Erwartungswerte von der Auslenkung q_r (q_r ist ja tatsächlich in der quantenmechanischen Behandlung ein hermitescher Operator) zu berechnen sind. Das erfordert eine Rücktransformation von den a 's zu q_r , d.h. zunächst zu den P 's und Q 's. Es galt ja: $Q_k = (\hbar/2\omega_k)^{1/2} (a_k + a_k^+)$ und $P_k = -i (\hbar\omega_k/2)^{1/2} (a_k - a_k^+)$. Der Leser bemerkt zunächst, dass die a 's nicht hermitesch sind. Wäre z.B. a_k hermitesch, müsste gelten:

$$\langle n-1, k | a_k | n, k \rangle = (\langle n, k | a_k | n-1, k \rangle)^* \quad (???)$$

Die linke Seite ist bis auf einen evtl. Phasenfaktor $n^{1/2} \langle n-1, k | n-1, k \rangle$, also $n^{1/2}$ (alle anderen Matrixelemente von a_k sind ohnehin 0), während die Zustände auf der rechten Seite, $|n, k\rangle$ und $|n-1, k\rangle$, zueinander orthogonal sind. Die a 's selbst können also nur indirekt zu messbaren Größen führen.

In die Transformations-Formel eingesetzt erhalten wir:

$$q_r = 1/\sqrt{N} \sum_k [Q_k(t) e^{ikr}] = 1/\sqrt{N} \sum_k (\hbar/2\omega_k m)^{1/2} (a_k + a_k^+) e^{ikr}$$

q_r dagegen ist hermitesch, weil man in der Summe zu jedem k auch ein $-k$ findet, so dass nach Umordnung die Kombinationen $(a_k e^{ikr} + a_k^+ e^{-ikr})$ auftreten. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \langle n-1, k | a_k e^{ikr} + a_k^+ e^{-ikr} | n, k \rangle &= \langle n-1, k | a_k e^{ikr} | n, k \rangle = n^{1/2} e^{ikr}, \text{ andererseits} \\ (\langle n, k | a_k e^{ikr} + a_k^+ e^{-ikr} | n-1, k \rangle)^* &= (\langle n, k | a_k^+ e^{-ikr} | n-1, k \rangle)^* \\ &= n^{1/2} e^{-ikr} \langle n, k | n, k \rangle = n^{1/2} e^{ikr}, \end{aligned}$$

wie zuvor (wieder bis auf einen evtl. Phasenfaktor).

Das hat eine überraschende Konsequenz. Der Erwartungswert von q_r bzgl. eines beliebigen n -Phonon-Zustands verschwindet:

$$\langle n, k | q_r | n, k \rangle = 0,$$

da alle Diagonalelemente der a 's verschwinden. Das heißt, wenn man in einem solchen Zustand die Auslenkung q_r eines beliebigen Atoms mit der Nummer r misst, erhält man zufällig streuende Werte mit dem Erwartungswert 0! Eine genauere Analyse (Anhang II) zeigt, dass $\langle n, k | q_r^2 | n, k \rangle \neq 0$ und dass damit auch die mittlere quadratische Abweichung $\Delta q_r \neq 0$ ist. In solchen Zuständen sind die Atome nicht in „Ruhe“, nur kann man an $\langle n, k | q_r | n, k \rangle$ keinerlei *Schwingung* erkennen. Die Analyse zeigt auch, dass in diesem Fall zwar die bestimmte Teilchenzahl zu einer scharfen (bestimmten) Amplitude führt, dass aber die Phase völlig unbestimmt ist. In Loudons Buch „The quantum theory of light“ [3] ist die entsprechende folgende bildliche Darstellung für *Photonen* zu finden, die fast unverändert auch für Phononen in Teilchen-Zuständen (mit bestimmter Phononen-Zahl) passt (Abb. 1).

146 The quantized radiation field

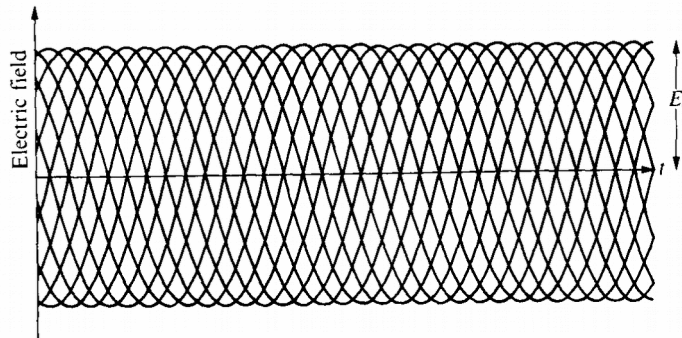


FIG. 4.2. Pictorial representation of the electric-field variation in a cavity mode excited to state $|n\rangle$. The sine waves should more accurately form a horizontal continuum. The amplitude E_0 is defined in the text.

Loudon: The quantum theory of light

Abb. 1: Bildliche Darstellung der Auslenkung eines Atoms in Abhängigkeit von der Zeit bei einem Teilchen-Zustand (Fock-Zustand), hier entsprechend dargestellt für Photonen.

Es ist also nicht möglich, sich eine bildliche Vorstellung der atomaren Schwingungen in der linearen Kette zu machen, wenn Phononen-Zustände mit einer bestimmten Phononenzahl vorliegen. Das ist typisch für **Fock-Zustände** (Zustände mit bestimmter Teilchenzahl): Bei ihnen ist die Amplitude bestimmt, aber die Phase beliebig unbestimmt, so dass **keinerlei Anzeichen von Wellen im dreidimensionalen Anschauungsraum erkennbar** sind, trotz oder gerade weil das Problem quantenmechanisch behandelt wurde! Fock-Zustände (Teilchenzahl-Zustände) sind schon recht eigenartig!

4. Kohärente Phononen-Zustände

1963 hat R. Glauber [1] eine Idee Schrödingers über kohärente Zustände aufgegriffen, sie auf Licht angewandt und damit Zählereignisse mit *Photonen* geklärt (Nobelpreis 2005). Seine Überlegungen sind seit den 90-er Jahren auch auf *Phononen* übertragen [1]-[5] worden.

Betrachtet werden Zustände mit einer einzigen Phononenmode, charakterisiert durch die Wellenzahl k . Es sei α eine beliebige komplexe Zahl. Sie kennzeichnet einen Zustand, der durch eine bestimmte Überlagerung von Zuständen mit bestimmter Phononen-Zahl (allg. von Fock-Zuständen) bei fester Wellenzahl k definiert wird:

$$|\alpha, k\rangle = \exp(-\frac{1}{2} |\alpha|^2) \sum_n \alpha^n / (n!)^{1/2} |n, k\rangle$$

Der Einfachheit halber wird er künftig mit $|\alpha\rangle$ abgekürzt. Es handelt sich also um einen bestimmten Zustand mit unbestimmter Phononen-Zahl. Messungen der Phononen-Zahl würden statistisch streuende Werte liefern.

Dieser Zustand ist normiert:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \exp(-|\alpha|^2) \sum_n \alpha^{*n} \alpha^n / n! = 1, \quad (***)$$

weil die Summe gerade die Taylor-Entwicklung von $\exp(-|\alpha|^2)$ darstellt. Aber die Zustände sind nicht orthogonal:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \beta \rangle &= \exp(-|\alpha|^2 - |\beta|^2) \sum_n \alpha^{*n} \beta^n / n! = \exp(-|\alpha|^2 - |\beta|^2 + \alpha^* \beta) \\ &= \exp(-|\alpha - \beta|^2) \end{aligned}$$

Die Zustände bilden ein überkomplettes System; nur, wenn $|\alpha - \beta| \gg 1$ sind die Zustände näherungsweise orthogonal. Diese Tatsache würde bei der Berechnung von thermischen Mittelwerten bei gemischten Zuständen (Stichwort Dichtematrix) Schwierigkeiten aufwerfen.

Ihre Bedeutung der kohärenten Zustände ergibt sich aus der Tatsache, dass sie Eigenzustände zum Vernichtungsoperator sind mit dem Eigenwert α :

$$\begin{aligned} a_k |\alpha\rangle &= \exp(-\frac{1}{2} |\alpha|^2) \sum_n \alpha^n / (n!)^{1/2} a_k |n, k\rangle \\ &= \exp(-\frac{1}{2} |\alpha|^2) \sum_n \alpha^n / (n!)^{1/2} n^{1/2} |n-1, k\rangle \\ &= \alpha \exp(-\frac{1}{2} |\alpha|^2) \sum_n \alpha^{n-1} / (n-1)!^{1/2} |n-1, k\rangle = \alpha |\alpha\rangle, \text{ also} \end{aligned}$$

$$a_k |\alpha\rangle = \alpha |\alpha\rangle \text{ und damit auch } \langle \alpha | a_k^\dagger = \alpha^* \langle \alpha |$$

Andererseits lässt sich beweisen, dass a_k^\dagger keine normierbaren Eigenzustände besitzt.

Welche physikalischen Folgerungen ergeben sich für solche kohärenten Zustände?

Zunächst ist der Erwartungswert der Phononenzahl auch hier messbar:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | N | \alpha \rangle &= \exp(-|\alpha|^2) \sum_n \alpha^{*n} \alpha^n / n! \langle n | N | n \rangle = \exp(-|\alpha|^2) \sum_n \alpha^{*n} \alpha^n / n! n \\ &= \exp(-|\alpha|^2) \sum_n \alpha^{*n-1} \alpha^{n-1} / (n-1)! \alpha^* \alpha = \alpha^* \alpha = |\alpha|^2 \end{aligned}$$

Dabei wurde die Normierungsbedingung (***) verwendet. Damit lässt sich $|\alpha|^2$ deuten: $|\alpha|^2$ ist die mittlere Zahl von Phononen $\langle n \rangle = \langle n_k \rangle$ in einem solchen kohärenten Zustand einer Phononen-Mode mit Wellenzahl k . Die Phase der komplexen Zahl α ist noch offen: $\alpha = \langle n_k \rangle^{1/2} e^{i\theta}$.

Die Beziehung $\langle \alpha | N | \alpha \rangle = \sum_n \exp(-|\alpha|^2) \alpha^{*n} \alpha^n / n! \langle n | N | n \rangle$ lässt sich auch auffassen als eine Entwicklung der mittleren Teilchenzahl nach den Erwartungswerten $\langle n | N | n \rangle = n$ der Teilchenzahl in Teilchenzahl-Zuständen $|n\rangle$. Eine bestimmte Teilchenzahl n tritt dann in einem kohärenten Zustand mit der Wahrscheinlichkeit

$$P(n) = \exp(-|\alpha|^2) |\alpha|^{2n} / n! = \exp(-\langle n \rangle) \langle n \rangle^n / n!$$

auf. Das ist eine Poisson-Verteilung. Poisson-verteilte Messwerte für Teilchenzahlen n sind typisch für kohärente Zustände. Eine Folge einer solchen Verteilung ist auch, dass die zeitliche Folge der (heute noch hypothetischen) Messwerte für die Phononen-Zahl ähnlich statistisch verteilt ist wie beim radioaktiven Zerfall: „Phononen haben – genauso wenig wie Photonen – keine Geschichte“. Oder auch, da ein (noch hypothetischer) Phononen-Nachweis mit einer Wahrscheinlichkeit eintritt, die unabhängig davon ist, wann zuvor ein Nachweis eingetreten ist: „Phononen haben – ähnlich wie Photonen – kein Gedächtnis“ (siehe Nobelvortrag von R. Glauber 2005 [6]). Eine solche Poisson-Verteilung ist vom radioaktiven Zerfall bekannt (der nichts mit kohärenten Zuständen zu tun hat), von der Photonen-Zahl in den einmodigen kohärenten Zuständen eines Lasers, und seit 2005 von bestimmten Atomlasern [7], [8].

Dann hat auch der Erwartungswert des Auslenkungsoperators q_r ein anschauliches physikalisches Ergebnis:

$$\begin{aligned} \langle \alpha, k | q_r | \alpha, k \rangle &= 1/\sqrt{N} \sum_{k'} (\hbar/2\omega_k m)^{1/2} \langle \alpha, k | (a_{k'} + a_{-k'}^\dagger) | \alpha, k \rangle e^{ikr} \\ &= 1/\sqrt{N} (\hbar/2\omega_k m)^{1/2} \langle \alpha, k | (a_k e^{ikr} + a_k^\dagger e^{-ikr}) | \alpha, k \rangle \end{aligned}$$

$a_{k'} | \alpha, k \rangle$ fügt nämlich dem Zustand $| \alpha, k \rangle$ ein weiteres Photon mit der Wellenzahl k' hinzu. Der entstehende Zustand ist orthogonal zu $| \alpha, k \rangle$, wenn nicht $k = k'$. Alle anderen Glieder mit $a_{k'}$ fallen also aus der Summe heraus. Ganz entsprechend wird durch $\langle \alpha, k | a_{-k'}^\dagger$ ein Zustand mit einem weiteren Phonon mit Wellenzahl $-k'$ erzeugt, der orthogonal ist zu $| \alpha, k \rangle$, wenn nicht $-k' = k$. Von der Summe überleben also nur zwei Terme (unter der Annahme, dass $\omega_k = \omega_{-k}$)

$$\begin{aligned} \langle \alpha | q_r | \alpha \rangle &= 1/\sqrt{N} (\hbar/2\omega_k m)^{1/2} (\langle \alpha | a_k | \alpha \rangle e^{ikr} + \langle \alpha | a_k^\dagger | \alpha \rangle e^{-ikr}) \\ &= 1/\sqrt{N} (\hbar/2\omega_k m)^{1/2} (\alpha e^{ikr} + \alpha^* e^{-ikr}) \\ \langle \alpha | q_r | \alpha \rangle &= 1/\sqrt{N} (\hbar/2\omega_k m)^{1/2} 2 \cos(kr - \omega_k t + \theta) \langle n_k \rangle^{1/2}. \end{aligned}$$

Dabei wurde die bisher unterdrückte Zeitabhängigkeit wieder explizit angeschrieben und auch die Phase θ . Allein schon wegen dieses Ergebnisses hat sich die ganze Mühe gelohnt! Die mittlere Auslenkung $\langle \alpha | q_r | \alpha \rangle$ in einem solchen Zustand verhält sich wie eine klassische Welle mit der Wellenzahl k , und das unabhängig von α , auch wenn der Zustand im Mittel nur ein Phonon enthält! Jetzt versteht man, weshalb erst klassische Schallwellen in Festkörpern entdeckt wurden, obwohl Schall ja tatsächlich auch der Quantenmechanik unterliegt. Im Unterschied dazu ist Interferenz ein quantenmechanischer Effekt bereits bei Ein-Teilchen-Zuständen, wenn eine Konkurrenz nicht unterschiedener klassisch denkbarer Möglichkeiten auftritt.

Die mittlere quadratische Abweichung der Teilchenzahl ergibt sich folgendermaßen: Zunächst ist

$$\begin{aligned} \langle \alpha | N^2 | \alpha \rangle &= \exp(-|\alpha|^2) \sum_n \alpha^{*n} \alpha^n / n! \langle n | N^2 | n \rangle \\ &= \exp(-|\alpha|^2) \sum_n \alpha^{*n} \alpha^n / n! n^2 \\ &= \exp(-|\alpha|^2) \sum_n \alpha^{*n} \alpha^n / n! [n(n-1) + n] \\ &= \exp(-|\alpha|^2) \sum_n \alpha^{*n} \alpha^n / n! n(n-1) + \exp(-|\alpha|^2) \sum_n \alpha^{*n} \alpha^n / n! n \\ &= \exp(-|\alpha|^2) \sum_n \alpha^{*n-2} \alpha^{n-2} / (n-2)! (\alpha^* \alpha)^2 + |\alpha|^2 \end{aligned}$$

also $\langle \alpha | N^2 | \alpha \rangle = |\alpha|^4 + |\alpha|^2$

Dann:

$$(\Delta N)^2 = \langle \alpha | N^2 | \alpha \rangle - \langle \alpha | N | \alpha \rangle^2 = |\alpha|^2$$

oder

$$\Delta N = |\alpha|$$

Die mittlere Teilchenzahl ist $|\alpha|^2$, die mittlere quadratische Abweichung $|\alpha|$, also (typisch für eine Poisson-Verteilung) $\Delta N = \sqrt{\langle n \rangle}$, d.h. die relative quadratische Abweichung ist

$$\Delta N / \langle \alpha | N | \alpha \rangle = 1 / |\alpha| = 1 / \sqrt{\langle n \rangle}$$

Mit zunehmender Phononen-Zahl strebt also die relative quadratische Abweichung gegen 0. Für $\langle n \rangle = |\alpha|^2$ gegen ∞ hat man damit eine *quasi* scharf definierte Teilchenzahl in einem kohärenten Zustand. Da die Phononen-Zahl in einem solchen Zustand nicht bestimmt ist, ist es auch nicht die Energie. Der Teilchenzahloperator und der Hamiltonoperator vertauschen nämlich. Wenn der eine Operator bestimmte Eigenwerte hat, gilt dies auch für den anderen.

Der Erwartungswert $\langle \alpha | q_r | \alpha \rangle$ der Teilchenschwingung des r-ten Atoms verhält sich wie der eines Atoms, das von einer klassischen Welle im dreidimensionalen Anschauungsraum erfasst ist. Kohärente Phononen gehören damit genauso wie kohärente Photonen und möglicherweise wie kohärente Atomstrahlen zu den wenigen Beispielen, wo in der Quantenphysik Wellen im dreidimensionalen Anschauungsraum vorkommen! Ihre Amplitude ist proportional zur Wurzel aus dem Erwartungswert der Teilchenzahl, die Auslenkung besitzt die Orts- und Zeitabhängigkeit einer klassischen Welle! Je größer die mittlere Phononen-Zahl, desto größer ist auch die Amplitude der Teilchenschwingung des r-ten Atoms. Damit ist eine Brücke geschlagen zwischen dem quantenmechanischen und dem klassischen Verhalten der linearen Kette!

Allerdings, die Quantenmechanik hat auch hier Auswirkungen: Wir wollen die mittlere quadratische Abweichung der Auslenkung des r-ten Atoms q_r berechnen. Zunächst:

$$\begin{aligned} \langle \alpha, q | q_r^2 | \alpha, q \rangle \\ = 1/N \sum_k \sum_{k'} (\hbar/2\omega_k m)^{1/2} (\hbar/2\omega_{k'} m)^{1/2} \langle \alpha, q | (a_k + a_{-k}^+)(a_{k'} + a_{-k'}^+) | \alpha, q \rangle e^{ikr} e^{ik'r} \end{aligned}$$

Wir multiplizieren die Operatoren aus und wenden eine Vertauschungsrelation an:

$$\begin{aligned} \langle \alpha, q | (a_k + a_{-k}^+)(a_{k'} + a_{-k'}^+) | \alpha, q \rangle e^{ikr} e^{ik'r} \\ = \langle \alpha, q | a_k a_{k'} e^{ikr} e^{ik'r} + a_k a_{-k'}^+ e^{ikr} e^{ik'r} + a_{-k}^+ a_{k'} e^{ikr} e^{ik'r} + a_{-k}^+ a_{-k'}^+ e^{ikr} e^{ik'r} | \alpha, q \rangle \\ = \langle \alpha, q | a_k a_{k'} e^{ikr} e^{ik'r} + a_{-k}^+ a_{k'} e^{ikr} e^{ik'r} + a_{-k}^+ a_{k'} e^{ikr} e^{ik'r} + a_{-k}^+ a_{-k'}^+ e^{ikr} e^{ik'r} + \delta_{-k, k'} | \alpha, q \rangle \end{aligned}$$

Wegen der Orthogonalität der entstehenden Zustände fallen wieder die meisten Glieder weg, außer, wenn $k = k' = q$ für das erste Glied, $-k = -k' = q$ für das vorletzte Glied, $-k' = k = q$ für das zweite und $-k = k' = q$ für das dritte. Das letzte liefert immer einen Beitrag, wenn $k = -k'$. Also

$$= \langle \alpha, q | \alpha^2 e^{iqr} e^{iqr} + \alpha^{*2} e^{-iqr} e^{-iqr} + 2\alpha^* \alpha + \sum_q 1 | n, q \rangle \text{ (symbolisch geschrieben)}$$

$$= \langle \alpha | (\alpha e^{iqr} + \alpha^* e^{-iqr})^2 + 1 | \alpha \rangle$$

$$= \langle \alpha | (\alpha e^{iqr} + \alpha^* e^{-iqr})^2 + 1 | \alpha \rangle$$

$$= 4 |\alpha|^2 \cos^2(qr - \omega_q t + \theta) + \sum_q 1 \text{ (symbolisch geschrieben)}$$

und damit (es wird wieder q durch k ersetzt):

$$\begin{aligned} \langle \alpha, k | q_r^2 | \alpha, k \rangle &= 1/N (\hbar/2\omega_k m) 4 |\alpha|^2 \cos^2(kr - \omega_k t + \theta) + 1/N \sum_{k'} (\hbar/2\omega_{k'} m) \\ &= 1/N (\hbar/2\omega_k m) 4 |\alpha|^2 \cos^2(kr - \omega_k t + \theta) + \langle q_r^2 \rangle_{\text{vak}} \end{aligned}$$

Der letzte Summand ist auch vorhanden, wenn $|\alpha| \Rightarrow 0$ und charakterisiert die sog. „Vakuumfluktuationen“. Diese sind auch experimentell beobachtbar. Weiter mit:

$$\begin{aligned} (\Delta q_r)^2 &= \langle \alpha | q_r^2 | \alpha \rangle - \langle \alpha | q_r | \alpha \rangle^2 \\ &= 1/N (\hbar/2\omega_k m) (4 |\alpha|^2 \cos^2(kr - \omega_k t + \theta) + \langle q_r^2 \rangle_{\text{vak}} - 4 \cos^2(kr - \omega_k t + \theta) |\alpha|^2) \\ &= \langle q_r^2 \rangle_{\text{vak}} \end{aligned}$$

also
$$\Delta q_r = [\langle q_r^2 \rangle_{\text{vak}}]^{1/2} = 1/\sqrt{N} [\sum_{k'} (\hbar/2\omega_{k'} m)]^{1/2}$$

im Vergleich zu

$$\langle \alpha | q_r | \alpha \rangle = 1/\sqrt{N} (\hbar/2\omega_k m)^{1/2} 2 \cos(kr - \omega_k t + \theta) |\alpha|$$

Das ist wiederum ein sehr überraschendes Ergebnis: Es besagt, dass die mittlere quadratische Abweichung der Atomauslenkung in kohärenten Zuständen unabhängig von der mittleren Phononen-Zahl ist. Die damit zusammenhängenden Fluktuationen sind ausschließlich **Vakuumfluktuationen**; die Bewegung infolge der Phononen fügt keine weiteren Fluktuationen hinzu. „Kohärente Zustände sind so ruhig wie Vakuum-Zustände“ (Hu und Nori [10], [11]), die ja auch nicht ganz „ruhig“ sind. Mit zunehmender mittlerer Phononen-Zahl $\langle n \rangle$ (mit zunehmendem $|\alpha|$) wird zwar die Amplitude immer größer, die mittlere quadratische Abweichung bleibt jedoch konstant. Sie fällt mit wachsendem $|\alpha|$ immer weniger ins Gewicht: Die Amplitude wird mit zunehmender mittlerer Phononen-Zahl immer „wohldefinierter“. $|\alpha|$ hängt davon ab, wie kohärente Phononen experimentell erzeugt werden.

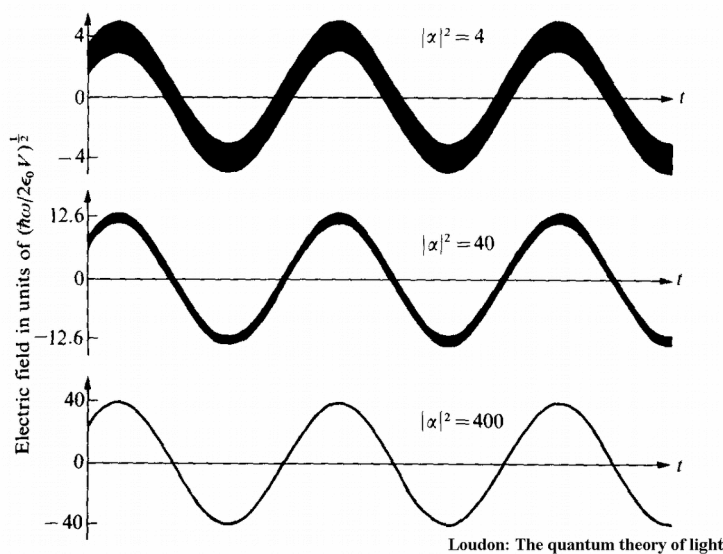


Abb. 2: Bildliche Darstellung der Auslenkung eines Atoms bei einem kohärenten Zustand mit unterschiedlicher mittlerer Phononen-Zahl $|\alpha|^2$. Eigentlich ist für entsprechend Photonenzustände die elektrische Feldstärke dargestellt.

Loudon [3] hat das für *Photonen* in Abb. 2 veranschaulicht.

In den Zeichnungen steckt indirekt auch eine Aussage über den Erwartungswert der Schwingungsphase. Ein Phasenoperator $\text{Exp}(i\varphi)$ kann so definiert werden:

$$a = (N+1)^{1/2} \text{Exp}(i\varphi) \text{ und } a^+ = \text{Exp}(-i\varphi)(N+1)^{1/2}$$

N ist der Teilchenzahloperator, $\text{Exp}(i\varphi)$ der Phasenoperator und a^+ , a sind Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Wegen der Operator-Eigenschaft kommt es auf die Reihenfolge an. Es wird sich herausstellen, dass N und $\text{Exp}(i\varphi)$ eben gerade nicht vertauschbare Operatoren sind, die dementsprechend nicht gleichzeitig messbare Messgrößen kennzeichnen.

Aus der Definition folgt:

$$\text{Exp}(i\varphi) = (N+1)^{-1/2} a \quad \text{und} \quad \text{Exp}(-i\varphi) = a^+ (N+1)^{-1/2}$$

Wir wollen den Phasenoperator auf einen n -Teilchen-Zustand anwenden:

$$\text{Exp}(i\varphi) |n\rangle = (N+1)^{-1/2} a |n\rangle = (N+1)^{-1/2} n^{1/2} |n-1\rangle = (n-1+1)^{-1/2} n^{1/2} |n-1\rangle = |n-1\rangle \quad \text{für } n \neq 0. \\ \text{bzw. } 0 \quad \text{für } n = 0$$

Ganz entsprechend:

$$\text{Exp}(-i\varphi) |n\rangle = a^+ (N+1)^{-1/2} |n\rangle = (n+1)^{-1/2} a^+ |n+1\rangle = (n+1)^{-1/2} (n+1)^{1/2} |n+1\rangle = |n+1\rangle.$$

Es stellt sich heraus, dass die so definierten Phasenoperatoren nicht hermitesch sind, also nicht Messgrößen entsprechen. Durch die Definitionen

$$\text{Cos}(\varphi) = 1/2 [\text{Exp}(i\varphi) + \text{Exp}(-i\varphi)] \text{ und}$$

$$\text{Sin}(\varphi) = 1/(2i) [\text{Exp}(i\varphi) - \text{Exp}(-i\varphi)]$$

erhält man aber hermitesche Operatoren, die Messgrößen entsprechen. Wie man leicht nachweisen kann, sind ihre einzigen von 0 verschiedenen Matrixelemente

$$\langle n-1 | \text{Cos}(\varphi) | n \rangle = \langle n | \text{Cos}(\varphi) | n-1 \rangle = 1/2$$

$$\langle n-1 | \text{Sin}(\varphi) | n \rangle = - \langle n | \text{Sin}(\varphi) | n-1 \rangle = 1/(2i)$$

Es lässt sich auch zeigen, dass die Phasenoperatoren und der Teilchenzahl-Operator nicht vertauschbar sind, d.h. zu nicht gleichzeitig messbaren Größen gehören. Aus der Vertauschungsrelation folgt dann wie üblich ein Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation für die zu erwartenden mittleren quadratischen Abweichungen.

Es gilt:

$$[N, \text{Cos}(\varphi)] = N \text{Cos}(\varphi) - \text{Cos}(\varphi) N \\ = 1/2 \{ N [\text{Exp}(i\varphi) + \text{Exp}(-i\varphi)] - [\text{Exp}(i\varphi) + \text{Exp}(-i\varphi)] N \} \\ = 1/2 \{ N(N+1)^{-1/2} a + N a^+ (N+1)^{-1/2} - (N+1)^{-1/2} a N - a^+ (N+1)^{-1/2} N \}.$$

Bringen wir mit Hilfe der Vertauschungsrelationen

$$[N, a] = N a - a N = -a \quad \text{und} \quad [N, a^+] = N a^+ - a^+ N = a^+$$

alle a 's ganz nach rechts und alle a^+ ganz nach links:

$$= 1/2 \{ N (N+1)^{-1/2} a + a^+ N (N+1)^{-1/2} + a^+ (N+1)^{-1/2} - (N+1)^{-1/2} N a - (N+1)^{-1/2} a - a^+ (N+1)^{-1/2} N \}.$$

Dann heben sich die meisten Operator-Ausdrücke weg bis auf

$$\frac{1}{2} \{ a^+ (N+1)^{-1/2} - (N+1)^{-1/2} a \}$$

Das ist aber wegen

$$\text{Sin}(\varphi) = 1/(2i)[\text{Exp}(i\varphi) - \text{Exp}(-i\varphi)] = 1/(2i)[(N+1)^{-1/2} a - a^+(N+1)^{-1/2}]$$

gerade $-i \text{Sin}(\varphi)$, also

$$[N, \text{Cos}(\varphi)] = -i \text{Sin}(\varphi)$$

Analog zeigt man

$$[N, \text{Sin}(\varphi)] = i \text{Cos}(\varphi)$$

($\text{Sin}(\varphi)$ und $\text{Cos}(\varphi)$ sind jeweils Operatoren.)

Hieraus ergeben sich nun wie üblich Un-bestimmtheitsrelationen, nämlich

$$\Delta n \Delta \text{cos}(\varphi) \geq \frac{1}{2} \langle \text{Sin}(\varphi) \rangle$$

und

$$\Delta n \Delta \text{sin}(\varphi) \geq \frac{1}{2} \langle \text{Cos}(\varphi) \rangle$$

Auf der rechten Seite sind die Erwartungswerte der Operatoren zu nehmen bzgl. der jeweils betrachteten Zustände.

Bei Teilchen-Zuständen (Fock-Zuständen; Zuständen mit bestimmter Teilchenzahl) sind die Erwartungswerte rechts 0. Das muss auch so sein, weil ja $\Delta n = 0$. Für die mittlere quadratische Abweichungen erhält man $\Delta \text{cos}(\varphi) = \Delta \text{sin}(\varphi) = 1/\sqrt{2}$, d.h. die Phasenwinkel können zwischen 0 und 2π streuen: vollständige Phasen-un-bestimmtheit! Das wurde durch das erste Bild Loudons [3] (Abb. 1) ausgedrückt.

Bei kohärenten Zuständen sieht die Sache ganz anders aus: Loudon [3] führt asymptotische Entwicklungen für große mittlere Teilchenzahl ($|\alpha|^2 \gg 1$) an mit dem Phasenwinkel θ von α ($\alpha = \langle n_k \rangle^{1/2} e^{i\theta}$):

$$\langle \alpha | \text{Cos}(\varphi) | \alpha \rangle = \cos(\theta) (1 - 1/8 |\alpha|^2 + \dots)$$

$$\langle \alpha | \text{Cos}^2(\varphi) | \alpha \rangle = \cos^2(\theta) - [\cos^2(\theta) - 1/2]/(2 |\alpha|^2) - \dots \quad \text{für } |\alpha|^2 \gg 1 \text{ in beiden Fällen.}$$

Die Rechnung interessiert hier weniger als das Ergebnis:

$$\Delta \text{cos}(\varphi) = \sin(\theta)/(2 |\alpha|)$$

Mit zunehmender mittlerer Teilchenzahl (bei $|\alpha|^2 \gg 1$) verschwindet die mittlere quadratische Abweichung des Phasenoperators. Ein entsprechendes Ergebnis gilt für $\Delta \text{sin}(\varphi)$. Das ist höchst bemerkenswert: Mit zunehmender mittlerer Teilchenzahl wird nicht nur die mittlere Amplitude immer besser definiert, sondern auch noch die Phase. Mit zunehmender mittlerer Phononenzahl verhalten sich kohärente Zustände quasi wie klassische Wellen im dreidimensionalen Anschauungsraum! Das wird durch Abb. 2 von Loudon [3] bildlich veranschaulicht.

Kohärente Zustände wurden 1963 von R. Glauber [1] ursprünglich für *Licht* angewandt. Sie werden dort durch *Lasermodes* recht gut realisiert, möglicherweise auch bei manchen *Atomlasern* [7], [8]. Es wurden für *Phononen* mit Hilfe von *Polaritonen* ganz entsprechend der aktuellen Forschung zu gequetschten Zuständen (squeezed states) von Licht ebenfalls gequetschte Zustände konstruiert (Hu und Mori [10], [11]). Solche Zustände erscheinen interessant, weil sie noch weniger „verrauscht“ sind als kohärente Zustände, die nur noch das „Vakuumrauschen“ zeigen. Möglicherweise lassen sich auch für andere Quasiteilchen wie Polaritonen oder Magnonen kohärente Zustände definieren. Weitere Beispiele von quantenmechanischen Zuständen, die klassischen Wellen im dreidimensionalen Anschauungsraum entsprechen, sind meines Wissens nicht bekannt. Wenn sonst in der Quantenphysik von dreidimensionalen Wellen die Rede ist, handelt es sich um *Wellenfunktionen* von Einzelteilchen-Zuständen, die aber Wellen in einem abstrakteren Konfigurationsraum darstellen und nur die eine Aufgabe haben, Wahrscheinlichkeitsvorhersagen für den Ausgang von Messungen an einem durch 3 Koordinaten gekennzeichneten Ort zu machen. Zwei-Teilchen-Zustände erfordern wegen der 6 Koordinaten der Orte, an denen die 2 Teilchen gemessen werden könnten, entsprechend bereits Wellen in einem mindestens 6-dimensionalen Konfigurationsraum. Tatsächliche Koordinaten erhalten die Teilchen erst durch eine Messung. Dann hat aber die Wellenfunktion ihren Dienst getan und ist irrelevant geworden.

5. Wo wirkt sich die quantenmechanische Behandlung von Phononen aus?

Die quantenmechanische Behandlung von Gitterschwingungen hat physikalische Folgen, die mit Fluktuationen, speziell den Vakuumfluktuationen, zu tun hat: Es hatte sich als Erstes eine endliche Grundzustandsenergie (Vakuumenergie) ergeben. Sie geht in physikalische Größen nicht ein, wohl aber ihre Folgen, die Vakuumfluktuationen, die man bei Betrachtung der atomaren Bewegung auch sehen könnte. Bei Photonen ist die Vakuumenergie sogar unendlich. Das stört nicht weiter, da alle energetischen Vorgänge Energien im Vergleich zur Vakuumenergie umfassen. Die Vakuumfluktuationen machen sich besonders bei tiefen Temperaturen bemerkbar. Der Debye-Waller-Faktor enthält nach quantenmechanischer Aussage einen Anteil, der mit verschwindender Temperatur endlich bleibt. Er hat Einfluss auf die Temperaturabhängigkeit der Peakhöhe bei der Neutronen- oder Röntgenstrahl-Beugung (Bragg-Streuung) und wirkt sich auf die Peakhöhe des rückstoßfreien Anteils bei der Mößbauer- γ -Emission oder -Absorption aus.

Die gesamte statistische Mechanik mit Zustandssumme, Entropie etc. und davon abgeleiteten Größen basiert auf Eigenzuständen zum Hamiltonoperator. Das können nur Fock-Zustände, also Zustände mit bestimmter Teilchenzahl sein, nicht also kohärente Zustände, weil Hamiltonoperator und Teilchenzahloperator vertauschbar, also gleichzeitig messbar sind. Die Fluktuationen bei Fock-Zuständen überschreiten aber die Vakuumfluktuationen um einen Anteil der proportional zur Phononen-Zahl wächst.

Kohärente Phononen-Zustände haben demgegenüber den Vorteil, dass ihr Rauschanteil nur in den Vakuumfluktuationen besteht, auch, dass man die Gitterschwingungen (bei hinreichender mittlerer Phononen-Zahl) direkt „sehen“ kann. Einen noch geringeren Rauschanteil kann man mit „gequetschten Zuständen“ erreichen.

Bei der Anregung von Phononen durch Neutronen- oder Röntgenstreuung entstehen in der Regel Fock-Zustände. Mit Hilfe von piezoelektrischen Schallgebern (bis 10^{10} Hz), oder stimulierter Brillouin- oder Raman-Streuung von Laserstrahlung lassen sich jedoch auch kohärente Zustände erzeugen [10], [11]. Anders als im Laser mit seinen kohärenten Photonen-Zuständen sind diese jedoch bei Phononen stark gedämpft und damit kurzlebig. Es gibt auch noch keine so guten Phononen-Re-

sonatoren wie beim Laser.

In Fallen (Paul-Fallen oder magneto-optische Fallen) lassen sich Ketten von wenigen Ionen erzeugen (z.B. Prof. Blatt, Innsbruck, und seine Gruppe). Es gibt von Prof. Blatt Videos, die Eigenschwingungen der Ionenkette visuell zeigen. Das ist nur bei klassischen Systemen oder bei kohärenten Zuständen in quantenmechanischen Systemen möglich.

Kohärente Phononen-Zustände können durch Studien des Reflexionsvermögens und der Transmission von Licht nachgewiesen werden, weil beide von den Atomschwingungen im Kristall abhängen.

Es gibt neuerdings auch die Möglichkeit, in Nanostrukturen einzelne Phononen zu zählen. Roukes und seine Gruppe [12] stellten (um 2000) einen winzigen Phononen-Resonator aus Siliziumnitrid her, aus dem einzelne Phononen nur durch dünne Quantendrähte mit einer Dicke von 500 Atomen entweichen können. Sie werden kalorimetrisch gezählt.

6. Zusammenfassung

Es wurde die Quantenphysik der linearen Kette durch Einführung von Teilchen, den Phononen, entwickelt. Phononen entsprechen weitgehend anderen Teilchen der Quantenphysik wie z.B. Photonen, erfordern aber keine relativistische Behandlung. Entsprechend der Wellenzahl k und der Kreisfrequenz ω_k der zugeordneten Normalschwingung der linearen Kette haben Phononen die Energie $\hbar\omega_k$ und den Quasiimpuls $\hbar k$ in Ausbreitungsrichtung. Man spricht von Quasiimpuls und deshalb auch von Quasiteilchen, weil die Impulse aus verschiedenen Brillouin-Zonen, z.B. $\hbar k$ und $\hbar(k+g)$ äquivalent sind, wenn g einem reziproken Gittervektor ($2\pi/d n$, n natürlich) entspricht. Für sie gilt kein echter Impulserhaltungssatz, sondern nur ein Analogon unter Einbeziehung eines reziproken Gittervektors, der in eine andere Brillouinzone führt. Für dreidimensionale Kristalle lässt sich auch ein Polarisationsvektor definieren, der die Schwingungsrichtung im Vergleich zur Ausbreitungsrichtung der Phononen charakterisiert. Phononen sind abzählbar, und sind deshalb im Sinne der Quantentheorie (Quasi-)Teilchen. Der Ausbreitung einer klassischen Welle in der linearen Kette entspricht in diesem Bild ein Gas von Phononen, die die Kette durchlaufen.

Es gibt **Eigenzustände des Teilchenzahloperators** N (Fock-Zustände), die zugleich Eigenzustände des Energieoperators H (Hamiltonoperators) sind. In solchen Zuständen ist die Teilchenzahl (Zahl der Phononen) ebenso wie die Energie bestimmt. Messungen unter gleichen Bedingungen liefern dann immer die gleichen Werte. Das sind die grundlegenden Zustände für alle thermodynamischen Funktionen im thermischen Gleichgewicht. Sie haben ungewöhnliche Eigenschaften, weil sie kein anschauliches Bild der Schwingung als Folge eines Phonons zulassen, weil die Auslenkung (wegen ihrer Phase) völlig unbestimmt ist und statistisch schwankende Werte bei Messungen liefern muss.

Es gibt auch, wie z.B. ähnlich bei Licht in Lasermoden, **kohärente Phononen-Zustände**. Das sind bestimmte Überlagerungen von Teilchen-Zuständen. Sie stellen die stärkste Annäherung der Quantenphysik an klassische Schwingungen und Wellen in der linearen Kette dar. Bei ihnen verhält sich der Erwartungswert der Auslenkung wie bei einer klassischen Welle. Fluktuationen in Amplitude und Phase wirken sich mit zunehmender mittlerer Phononenzahl $\langle n \rangle$ immer weniger aus. Im $\lim_{\langle n \rangle \rightarrow \infty}$ wird die Auslenkung in Abhängigkeit von Zeit und Ort quasi exakt durch klassische Wellen beschrieben. Möglicherweise haben solche Zustände (und daraus entwickelte gequetschte Zustände) in Zukunft auch praktische Bedeutung wegen ihres geringeren Rauschens, das nur durch Vakuumfluktuationen bestimmt ist. In solchen Zuständen sind die Phononenzahl und damit auch die Energie unbestimmt. Messungen beider Größen würden unter gleichen Bedingungen statistisch

schwankende Werte liefern. Von der Theorie her hat man keinerlei Anhalt für eine eventuelle Vermutung, dass irgendein realer Mechanismus die Phononen-Zahl oder die Energie ändern würde, z.B. weil ein anderes Teilchen die Energie übertrage (was vorkommen kann, sich aber im Formalismus zeigt und hier nicht erfasst ist.) Vielmehr liegen statistisch schwankende Werte daran, dass Energie und Phononen-Zahl in solchen Zuständen ohne eine Messung nicht als Eigenschaften der linearen Kette existieren. Erst bei einer Messung erhalten sie – wie üblich in der Quantenphysik – einen bestimmten, statistisch fluktuierenden Wert. Ähnlich gibt es ja auch keinen realen Mechanismus, der dafür sorgt, dass beim radioaktiven Zerfall mal dieses, mal jenes Atom zerfällt, oder dass bei Ortsmessungen an Teilchen, die nicht in einem Eigenzustand des Orts sind, streuende Orts-Messergebnisse auftreten.

Tatsächlich gemessene Phononen-Zahlen in einem kohärenten Zustand entsprechen einer Poisson-Verteilung, wie das auch von anderen kohärenten Zuständen (z.B. bei Licht) bekannt ist. Die Wahrscheinlichkeit, ein Phonon nachzuweisen (wenn das tatsächlich möglich sein sollte), ist unabhängig davon, wann sein Vorgänger nachgewiesen wurde: „Phononen haben – genauso wie Photonen – keine Geschichte.“

Hinweis: Das Wort „bestimmt“ wird hier immer mit Bindestrich geschrieben, (also be-stimmt; entsprechend auch un-be-stimmt) wenn im Sinne der Heisenbergschen Un-be-stimmtheitsrelation darauf hingewiesen werden soll, dass sich das System in einem Eigenzustand zur betreffenden Messgröße befindet. „Bestimmt“ ohne Bindestrich geschrieben kennzeichnet die umgangssprachliche Bedeutung des Wortes.

Anhang I

7. Transformation des Hamiltonoperator in Normalkoordinaten

Wegen $q_r = 1/\sqrt{N} \sum_k [Q_k(t) e^{ikr}]$ gilt auch

$$q_r^\bullet = 1/\sqrt{N} \sum_k [Q_k^\bullet(t) e^{ikr}]$$

Für die kinetische Energie E_{kin} finden wir also

$$\begin{aligned} E_{kin} &= \sum_r m/2 (q_r^\bullet)^2 = \sum_r \sum_k \sum_{k'} [Q_k^\bullet e^{ikr}] [Q_{k'}^\bullet e^{ik'r}] \\ &= m/2N \sum_k \sum_{k'} Q_k^\bullet Q_{k'}^\bullet \sum_r e^{i(kr+k'r)} \end{aligned}$$

Wie man in jedem Lehrbuch der Festkörperphysik nachlesen kann, gilt für die Gittersumme:

$$\sum_r e^{i(k+k')r} = N \delta_{-k,k'} \quad \text{für die erlaubten } k\text{-Werte der linearen Kette}$$

Deshalb vereinfachen sich die k - und k' -Summen auf

$$E_{kin} = m/2 \sum_k Q_k^\bullet Q_{-k}^\bullet$$

Ganz entsprechend wird aus der potentiellen Energie:

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{2} f \sum_r [q_{r-1} - q_r]^2 = \frac{1}{2N} f \sum_r \sum_k \sum_{k'} Q_k [e^{ik(r-1)} - e^{ikr}] Q_{k'} [e^{ik'(r-1)} - e^{ik'r}] \\ &= \frac{1}{2N} f \sum_k \sum_{k'} Q_k Q_{k'} \sum_r [e^{ik(r-1)} - e^{ikr}] [e^{ik'(r-1)} - e^{ik'r}] \\ &= \frac{1}{2N} f \sum_k \sum_{k'} Q_k Q_{k'} \sum_r [e^{ik(r-1)} e^{ik'(r-1)} - e^{ik(r-1)} e^{ik'r} - e^{ikr} e^{ik'(r-1)} + e^{ikr} e^{ik'r}] \\ &= \frac{1}{2N} f \sum_k \sum_{k'} Q_k Q_{k'} \sum_r e^{i(k+k')r} [e^{-ik} e^{-ik'} - e^{-ik} - e^{-ik'} + 1] \end{aligned}$$

Aus der Gittersumme über r wird wieder $N \delta_{-k,k'}$ und damit

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} f \sum_k Q_k Q_{-k} [2 - (e^{-ik} + e^{ik})] \\ &= f \sum_k Q_k Q_{-k} [1 - \cos(k)] \end{aligned}$$

Der Hamiltonoperator wird damit

$$H = T + U = m/2 \sum_k Q_k^\bullet Q_{-k}^\bullet + f \sum_k Q_k Q_{-k} [1 - \cos(k)]$$

bzw. mit

$$\omega_k = \sqrt{2f/m (1 - \cos k)} = 2 \sqrt{f/m} \sin(k/2)$$

$$H = [\frac{1}{2} m \sum_k Q_k^\bullet Q_{-k}^\bullet + \frac{1}{2} m \sum_k \omega_k^2 Q_k Q_{-k}]$$

Die kanonischen Impulse zu Q_k und Q_{-k} erhält man dann durch

$P_k = \partial H / \partial Q_k^\bullet = m Q_{-k}^\bullet$ (in der Summe gibt es zwei Beiträge mit Q_k^\bullet : zu dem mit k auch den mit dem negativen Wert von k), also

$$H = [\frac{1}{2} m \sum_k P_k(t) P_{-k}(t) + \frac{1}{2} m \sum_k \omega_k^2 Q_k(t) Q_{-k}(t)]$$

Anhang II

8. Berechnung der Auslenkungsfluktuationen bei Fock-Zuständen (Zuständen mit bestimmter Phononen-Zahl)

$$\begin{aligned} \langle n, q | q_r^2 | n, q \rangle \\ = 1/N \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} (\hbar/2\omega_{\mathbf{k}m})^{1/2} (\hbar/2\omega_{\mathbf{k}'m})^{1/2} \langle n, q | (a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^+) (a_{\mathbf{k}'} + a_{-\mathbf{k}'}^+) | n, q \rangle e^{i\mathbf{k}r} e^{i\mathbf{k}'r} \end{aligned}$$

Wir multiplizieren die Operatoren aus und wenden eine Vertauschungsrelation an:

$$\begin{aligned} \langle n, q | (a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^+) (a_{\mathbf{k}'} + a_{-\mathbf{k}'}^+) | n, q \rangle e^{i\mathbf{k}r} e^{i\mathbf{k}'r} \\ = \langle n, q | a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}r} e^{i\mathbf{k}'r} + a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}'}^+ e^{i\mathbf{k}r} e^{i\mathbf{k}'r} + a_{-\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}r} e^{i\mathbf{k}'r} + a_{-\mathbf{k}}^+ a_{-\mathbf{k}'}^+ e^{i\mathbf{k}r} e^{i\mathbf{k}'r} | n, q \rangle \\ = \langle n, q | a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}r} e^{i\mathbf{k}'r} + \mathbf{a}_{-\mathbf{k}}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}r} e^{i\mathbf{k}'r} + \mathbf{a}_{-\mathbf{k}}^+ \mathbf{a}_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}r} e^{i\mathbf{k}'r} + a_{-\mathbf{k}}^+ a_{-\mathbf{k}'}^+ e^{i\mathbf{k}r} e^{i\mathbf{k}'r} + \delta_{-\mathbf{k}\mathbf{k}'} | n, q \rangle \end{aligned}$$

Wegen der Orthogonalität der entstehenden Zustände fallen in der Doppelsumme wieder die meisten Glieder weg, außer, wenn $\mathbf{k} = \mathbf{k}' = \mathbf{q}$ für das erste Glied, $-\mathbf{k} = -\mathbf{k}' = \mathbf{q}$ für das vorletzte Glied, $-\mathbf{k}' = \mathbf{k} = \mathbf{q}$ für das zweite und $-\mathbf{k} = \mathbf{k}' = \mathbf{q}$ für das dritte. Das letzte liefert immer einen Beitrag, wenn $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$. Es fallen auch alle Beiträge weg, bei denen die beiden a 's die Teilchenzahl ändern. Es überleben nur die fettgedruckten Terme. Also

$$= \langle n, q | 2n + \sum_{\mathbf{q}} 1 | n, q \rangle \quad (\text{symbolisch geschrieben})$$

Damit also,

$$\langle n, q | q_r^2 | n, q \rangle = 1/N (\hbar/2\omega_{\mathbf{q}m}) 2n + 1/N \sum_{\mathbf{k}} (\hbar/2\omega_{\mathbf{k}m})$$

Wegen $\langle n, q | q_r | n, q \rangle = 0$ ist das wieder gleich dem Quadrat $(\Delta q_r)^2$ der mittleren quadratischen Abweichung

$$(\Delta q_r)^2 = \hbar/(\omega_{\mathbf{q}mN}) n + \langle q_r^2 \rangle_{\text{vak}}$$

Zusätzlich zu den Vakuumfluktuationen $\langle q_r^2 \rangle_{\text{vak}}$, die bei kohärenten Zuständen den alleinigen Beitrag bilden, treten also in Fock-Zuständen weitere Fluktuationen auf, die mit zunehmender Teilchenzahl n zunehmen. Kohärente Zustände sind weniger „verrauscht“ als Teilchen-Zustände.

9. Literatur

kohärente Zustände:

- [1] R.J. Glauber, Phys. Rev. **131**, 2766, 1963
- [2] H. Paul, Photonen, Eine Einführung in die Quantenoptik, Teubner, Stuttgart, 1995
- [3] R. Loudon, The quantum theory of light, Clarendon Press, Oxford, 2000
- [4] M.O. Scully, M. S. Zubairy, Quantum Optics, Cambridge University Press, Cambridge, 1997
- [5] http://people.deas.harvard.edu/~jones/ap216/lectures/ls_3/ls3_u3/ls3_unit_3.html
- [6] Nobelvortrag R.J. Glauber, 2005

Poisson-Verteilung der Atomzahlen eines Atomlasers:

- [7] Schellekens, R. Hoppeler, A. Perrin, J. Viana Gomes, D. Boiron, A. Aspect, C. I. Westbrook, Hanbury Brown Twiss Effect for Ultracold Quantum Gases, *Science* **310**, no. 5748, 648 - 651, 2005
- [8] A. Öttl, S. Ritter, M. Köhl, T. Esslinger, Correlations and Counting Statistics of an Atom Laser, Phys. Rev. Lett. **95**, 1 - 4, 2005

kohärente Phononen:

- [9] Philip L. Marston, ASA 125th Meeting Ottawa 1993 May, Classical sound waves as a coherent superposition of phonons
- [10] Xuedong Hu and Franco Nori, Quantum Phonon Optics: Coherent and Squeezed Atomic Displacements, arXiv:cond-mat/9609223 v1 23 Sep 1996, 9609223.pdf, 1996
- [11] Xuedong Hu, Franco Nori, Phonon squeezed states: quantum noise, reduction in solids, Physica B **263–264** 16–29, 1999

Experimente mit einzelnen Phononen:

- [12] K Schwab *et al.*, Measurement of the quantum of thermal conductance, *Nature* **404**, 974, 2000