

# Der harmonische Oszillator

Von PETER FRANZKE in Berlin

Ein schwingungsfähiges Teilchen der Masse  $m$  in einem Parabelpotential mit der potentiellen Energie  $E_{pot} = \frac{1}{2}kx^2$  ( $k$  reell und  $>0$ ) und der Rückstellkraft  $F = -\frac{dE_{pot}}{dx} = -kx$  wird harmonischer Oszillator genannt. Klassisch wird die Bewegung des Teilchens durch die lineare, gewöhnliche Differentialgleichung

2. Ordnung  $m\frac{d^2x}{dt^2} + kx = 0$  beschrieben. Als Lösung dieser Gleichung erhält man harmonische

Schwingungen  $x(t) = A \cos \omega t$  um die Ruhelage mit der Eigenfrequenz  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ , der

Amplitude  $A = x(t=0)$ , dem Impuls  $p = m\frac{dx(t)}{dt} = -Am\omega \sin \omega t$  und der Gesamtenergie

$$E_{klass} = E_{kin} + E_{pot} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 = \frac{1}{2}kA^2, \text{ d. h. } E_{klass} : A^2.$$

Als Max Planck ab 1894 die Intensitätsverteilung der Strahlung eines „Schwarzen Körpers“ untersuchte, konnte er zunächst den allgemeinen Zusammenhang zwischen der spektralen Strahlungsdichte, der Wellenlänge und der Temperatur der Hohlraumstrahlung auf Grund experimenteller Befunde „nur“ als empirische Formel angeben. Eine theoretische Begründung seiner Formel gelang ihm erst, nachdem er im Jahre 1899, im völligen Gegensatz zur klassischen Physik, von der Hypothese ausging, dass die einzelnen schwingenden Atome des Festkörpers bei Emission bzw. Absorption von Strahlung die Energie nicht kontinuierlich abgeben bzw. aufnehmen können, sondern dass der Energieaustausch nur in diskreten Portionen von dezidiert Größe, den Energiequanten, erfolgt. Das bedeutet, dass die atomaren Oszillatoren nur in bestimmten, diskreten Energiezuständen schwingen können, ein Verhalten, das, wie oben schon erwähnt, klassisch nicht erklärt werden konnte und Planck zur Einführung der vorher unbekanntes Naturkonstanten  $h$  zwang.

**Ein Oszillator kann nur Energiebeträge aufnehmen, enthalten oder abgeben, die ein ganzes Vielfaches der mit der Konstanten multiplizierten Eigenfrequenz  $f$  des Oszillators sind (Planck, 1900):**

$$E = nhf = n\mathbf{h}\omega, \quad n = 1, 2, 3, \mathbf{K}$$

mit  $h = 6,6262 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$  (Plancksches Wirkungsquantum) und  $\mathbf{h} := \frac{h}{2\pi}$ .

Die folgenden Ausführungen sollen zeigen, wie die Plancksche Quantenhypothese mit Hilfe der Schrödinger-Wellengleichung zur Beschreibung des Wellenfeldes eines Teilchens der Masse  $m$  im Potentialfeld  $E_{pot} = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$  untermauert werden kann.

Ausgangspunkt für die quantenmechanische Behandlung des harmonischen Oszillators ist die eindimensionale, zeitunabhängige (= stationäre) Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + E_{\text{pot}} \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x).$$

Einsetzen der potentiellen Energie in die Gleichung liefert

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x), \text{ woraus}$$

$$\frac{1}{2m} \left( m^2 \omega^2 x^2 \cdot \psi(x) - \hbar^2 \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} \right) = E \cdot \psi(x) \text{ folgt.}$$

Da in dieser Gleichung der Term  $x^2$  auftritt, liegt eine lineare gewöhnliche Differentialgleichung 2. Ordnung in der Form der so genannten Weberschen Differentialgleichung vor. Um Lösungen dieser Gleichung zu finden, wende ich einen Trick an. Zunächst klammere ich auf der linken Seite der Gleichung formal die Wellenfunktion  $\psi(x)$  aus

$$\frac{1}{2m} \left( m^2 \omega^2 x^2 - \hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (1)$$

und fasse den Klammerausdruck  $D := m^2 \omega^2 x^2 - \hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$  als einen linearen Differentialoperator  $D$  auf, d. h. als eine lineare Abbildung  $f(x) \mapsto g(x)$ , die jeder mindestens zweimal stetig differenzierbaren Funktion  $f(x)$  die stetige Funktion  $g(x)$ , definiert durch  $Df(x) = g(x) := m^2 \omega^2 x^2 f(x) - \hbar^2 f''(x)$ , zuordnet.

Linearität bedeutet, dass für alle Funktionen  $f_1, f_2$  aus dem Definitionsbereich und für alle reellen Zahlen  $\alpha_1, \alpha_2$

$$D(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2) = \alpha_1 Df_1 + \alpha_2 Df_2 \text{ gilt.}$$

Der Klammerausdruck erinnert an die 3. Binomische Formel, so dass es nahe liegt, die linearen Differentialoperatoren

$$d^- := m\omega x - \hbar \frac{d}{dx} \text{ und } d^+ := m\omega x + \hbar \frac{d}{dx}$$

einzuführen.

Die Hintereinanderschaltung  $d^- \circ d^+$  der beiden Operatoren liefert mit Hilfe der Produktregel für differenzierbare Funktionen

$$(d^- \circ d^+) \psi(x) = d^- (d^+ \psi(x)) = \left[ m\omega x - \hbar \frac{d}{dx} \right] \left( m\omega \cdot x \cdot \psi(x) + \hbar \frac{d\psi(x)}{dx} \right) =$$

$$\begin{aligned}
&= m^2 w^2 x^2 y(x) + \mathbf{h} m w \cdot x \cdot y'(x) - \mathbf{h} m w \cdot y(x) - \mathbf{h} m w \cdot x \cdot y'(x) - \mathbf{h}^2 y''(x) \\
&= -\mathbf{h} m w y(x) + m^2 w^2 x^2 y(x) - \mathbf{h}^2 \frac{d^2 y(x)}{dx^2}.
\end{aligned}$$

Die Wellengleichung (1) kann nun durch die äquivalente Gleichung

$$\frac{1}{2m} (d^- \mathbf{0} d^+) y(x) = \frac{1}{2m} d^- (d^+ y(x)) = (E - \frac{1}{2} \mathbf{h} w) \cdot y(x) \quad (2)$$

ersetzt werden.

Multiplikation dieser Gleichung von links mit  $y(x)$  und Integration über

ganz  $\mathbb{R}$  liefert, unter Berücksichtigung der Normierungsbedingung  $\int_{-\infty}^{\infty} y^2(x) dx = 1$ ,

$$\frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} y(x) d^- (d^+ y(x)) dx = (E - \frac{1}{2} \mathbf{h} w) \cdot \int_{-\infty}^{\infty} y^2(x) dx = E - \frac{1}{2} \mathbf{h} w \quad (3).$$

Ich setze  $d^+ y(x) := j(x)$  und integriere die linke Seite der Gleichung partiell.

Nach Voraussetzung ist die Funktion  $y(x)$  quadratisch integrierbar

(d. h.  $\int_{-\infty}^{\infty} y^2(x) dx < \infty$ ); weiterhin soll  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} y(x) = 0$  gelten (vgl. Anhang S. 18).

Nach einigen Umformungen der linken Seite der Gleichung (3) erhält man

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} y(x) d^- j(x) dx &= \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} y(x) \left( m w x - \mathbf{h} \frac{d}{dx} \right) j(x) dx \\
&= \frac{1}{2m} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} m w x y(x) j(x) dx - \mathbf{h} \int_{-\infty}^{\infty} y(x) \frac{dj(x)}{dx} dx \right] = \\
&= \frac{1}{2m} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} m w x y(x) j(x) dx - \mathbf{h} \cdot \lim_{z \rightarrow \infty} [y(x) j(x)]_{-z}^z + \mathbf{h} \int_{-\infty}^{\infty} j(x) \frac{dy(x)}{dx} dx \right] \\
&= \frac{1}{2m} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} m w x y(x) j(x) dx + \mathbf{h} \int_{-\infty}^{\infty} j(x) \frac{dy(x)}{dx} dx \right] =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} j(x) \left( m\omega x y(x) + \hbar \frac{dy(x)}{dx} \right) dx = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} j(x) \left( m\omega x + \hbar \frac{d}{dx} \right) y(x) dx \\
&= \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} j(x) d^+ y(x) dx = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} j^2(x) dx \geq 0,
\end{aligned}$$

so dass, zusammen mit Gleichung (3),

$$E - \frac{1}{2} \hbar \omega = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} y(x) d^-(d^+ y(x)) dx \geq 0 \text{ bzw.}$$

$$E - \frac{1}{2} \hbar \omega \geq 0$$

gelten muss.

Daraus folgt:

**Der kleinste mögliche Energiewert, die so genannte Nullpunktsenergie oder Lokalisationsenergie, ist  $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$ .**

Ohne Energiequelle erreicht der quantenmechanische harmonische Oszillator seine Minimalenergie  $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega > 0$  bei der Temperatur  $T = 0 \text{ K}$ .

Dabei handelt es sich um eine typische Eigenschaft quantenphysikalischer Objekte, nämlich dass deren Energiewerte im tiefsten Energiezustand nie null werden können, ein Wesenszug der Quantenobjekte, der zwar mit der klassischen Physik nicht erklärt werden, aber an dieser Stelle mit Hilfe der Heisenbergschen Unschärfe - bzw. Unbestimmtheitsrelation  $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$  für Ort und Impuls exemplifiziert werden kann:

$E_{\text{klass}} = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$  ist die klassische Gesamtenergie des harmonischen Oszillators. Könnte sich das Teilchen in einem Zustand mit der Gesamtenergie Null befinden, so müssten der Ort  $x$  und der Impuls  $p$  gleichzeitig exakt null sein, im Widerspruch zur Unbestimmtheitsrelation.

Mit Hilfe der Heisenbergschen Unschärferelation kann man auch die niedrigste Energie  $E_0$  der Größenordnung nach abschätzen:

Setzt man die Unschärfebeziehung in der Form  $|p| \geq \frac{\hbar}{2|x|}$  in die Gleichung

$$E_{klass} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \text{ ein,}$$

so erhält man den „halbklassischen“ Energieausdruck

$$E_{hklass}(x) = \frac{\hbar^2}{8mx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

dessen Minimum gesucht wird.

$$\text{Aus } \frac{d}{dx} E_{hklass}(x_{\min}) = -\frac{\hbar^2}{4mx_{\min}^3} + m\omega^2 x_{\min} = 0 \text{ folgt } x_{\min} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}.$$

Wegen  $\lim_{x \rightarrow 0^+} E_{hklass}(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} E_{hklass}(x) = \infty$  liegt ein Minimum vor.

Einsetzen von  $x_{\min}$  in den Energieausdruck  $E_{hklass}(x)$  liefert  $E_{\min} = \frac{1}{2}\hbar\omega = E_0$ .

Zu dem Energiewert  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$  gehört nach Gleichung (2) ein Zustand, dessen zugehörige Wellenfunktion (=Wahrscheinlichkeitsamplitude)  $y_0(x)$  der Gleichung  $d^+y_0(x) = 0$  genügt, d. h. es gilt

$$m\omega x y_0(x) = -\hbar \frac{dy_0}{dx}.$$

Diese Differentialgleichung 1. Ordnung kann man durch Trennung der Variablen relativ einfach integrieren:

$$\frac{dy_0}{y_0(x)} = -\frac{m\omega}{\hbar} \cdot x dx \Rightarrow \ln y_0(x) = \text{konst} - \frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2, \text{ d. h.}$$

$$y_0(x) = \hat{N}_0 \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2\right).$$

Substituiert man  $x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x$  ( $\Rightarrow dx = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \cdot dx$ ) und bedient sich der Integrale

$$\int_{-\infty}^{\infty} y_0^2(x) dx = 1 \text{ sowie } \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}, \text{ erhält man die Konstante } \hat{N}_0:$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} y_0^2(x) dx = N_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) dx = N_0^2 \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) dx = N_0^2 \cdot \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \cdot \sqrt{\pi} = 1,$$

also

$$N_0 = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}.$$

**Ergebnis: Die Wellenfunktion  $\psi_0(x)$  und die Nullpunktenergie  $E_0$  für den Grundzustand des harmonischen Oszillators lauten:**

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) \quad \text{und} \quad E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega.$$

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Ortsintervall  $[x; x + dx]$  zu finden, ist

$$\psi_0^2(x) dx = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) dx.$$

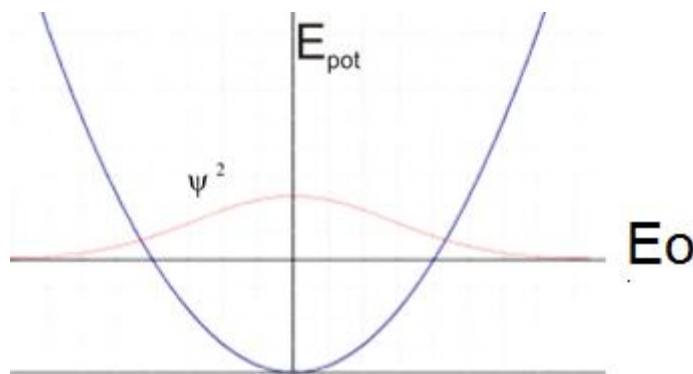


Abb. 1: Nullpunktenergie  $E_0$  und Wahrscheinlichkeitsdichte im Parabelpotential des harmonischen Oszillators

Um bei der Berechnung der Energien und Wellenfunktionen der energetisch höher liegenden Zustände lästige Schreiarbeit zu vermeiden, liegt es nahe, die Differentialoperatoren mit

Hilfe der Substitution  $x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x \quad \left( \Rightarrow dx = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \cdot dx \right)$  umzuschreiben:

$$d^- = m\omega x - \hbar \frac{d}{dx} = \hbar \left( \frac{m\omega}{\hbar} x - \frac{d}{dx} \right) = \hbar \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) = \sqrt{m\omega\hbar} \cdot \left( x - \frac{d}{dx} \right) \quad \text{und}$$

$$\text{analog } d^+ = m\omega x + \hbar \frac{d}{dx} = \sqrt{m\omega\hbar} \cdot \left( x + \frac{d}{dx} \right).$$

Ich beweise zunächst die Vertauschungsregel

$$d^+ \circ d^- - d^- \circ d^+ = 2m\omega\hbar. \quad (\text{VTR}).$$

Das bedeutet, dass das Produkt der beiden Differentialoperatoren  $d^-$  und  $d^+$

bzgl. der Hintereinanderschaltung der beiden Abbildungen nicht kommutativ ist:

$$d^- \circ d^+ \neq d^+ \circ d^-.$$

**Beweis:** Für alle zweimal stetig differenzierbaren Funktionen  $f(x)$  gilt:

$$\begin{aligned}
 & (d^+ \circ d^- - d^- \circ d^+) f(x) = (d^+ \circ d^-) f(x) - (d^- \circ d^+) f(x) \\
 &= m\hbar \cdot \left[ \left( x + \frac{d}{dx} \right) \left( \left( x - \frac{d}{dx} \right) f(x) \right) - \left( x - \frac{d}{dx} \right) \left( \left( x + \frac{d}{dx} \right) f(x) \right) \right] \\
 &= m\hbar \cdot \left[ \left( x + \frac{d}{dx} \right) \left( x \cdot f(x) - \frac{df(x)}{dx} \right) - \left( x - \frac{d}{dx} \right) \left( x \cdot f(x) + \frac{df(x)}{dx} \right) \right] \\
 &= m\hbar \cdot \left[ x^2 \cdot f(x) - x \frac{df(x)}{dx} + \frac{d(x \cdot f(x))}{dx} - \frac{d^2 f(x)}{dx^2} - \left( x^2 \cdot f(x) + x \frac{df(x)}{dx} - \frac{d(x \cdot f(x))}{dx} - \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \right) \right] \\
 &= m\hbar \cdot \left[ -2x \frac{df(x)}{dx} + 2 \frac{d(x \cdot f(x))}{dx} \right] = 2m\hbar \cdot \left[ -x \frac{df(x)}{dx} + x \frac{df(x)}{dx} + f(x) \right] = 2m\hbar f(x). \quad \mathbf{W}
 \end{aligned}$$

Für die Wellenfunktion  $y_n(x)$  des  $n$ -ten angeregten Zustands ( $n \geq 1$ ) mit der Energie  $E_n$  gilt nach Gleichung (2)

$$\frac{1}{2m} (d^- \circ d^+) y_n(x) = \frac{1}{2m} d^- (d^+ y_n(x)) = (E_n - \frac{1}{2} \hbar \omega) \cdot y_n(x) \quad (4)$$

mit  $d^+ y(x) \neq 0$ , da andernfalls der Grundzustand vorläge.

Ich wende auf Gleichung (4) (von links) den Operator  $d^+$  an. Assoziativgesetz für das Produkt von Abbildungen und Vertauschungsregel liefern dann

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2m} (d^+ \circ (d^- \circ d^+)) y_n(x) &= \frac{1}{2m} ((d^+ \circ d^-) \circ d^+) y_n(x) = \frac{1}{2m} (d^+ \circ d^-) (d^+ y_n(x)) \\
 &= \frac{1}{2m} (2m\hbar \mathbf{h} + d^- \circ d^+) d^+ y_n(x) = \frac{1}{2m} (2m\hbar \mathbf{h} d^+ y_n(x) + d^- \circ d^+ (d^+ y_n(x))) = \left( E_n - \frac{1}{2} \hbar \omega \right) \cdot d^+ y_n(x),
 \end{aligned}$$

$$\text{d. h. } \frac{1}{2m} d^- \circ d^+ (d^+ y_n(x)) = \left( E_n - \hbar \omega - \frac{1}{2} \hbar \omega \right) \cdot d^+ y_n(x) \dots$$

Setzt man  $f_n(x) := d^+ y_n(x)$  und  $\hat{E}_n = E_n - \hbar \omega$ , erhält man

$$\frac{1}{2m} (d^- \circ d^+) f_n(x) = \left( \hat{E}_n - \frac{1}{2} \hbar \omega \right) \cdot f_n(x).$$

Der Vergleich mit Gleichung (2) zeigt, dass die Funktion  $f_n(x)$  der Schrödinger-Gleichung mit dem Energiewert  $\hat{E}_n = E_n - \hbar\omega$  genügt. Wiederholte, analoge Anwendung des Differentialoperators  $d^+$  liefert somit der Reihe nach Zustände mit den Energiewerten  $E_n - 1 \cdot \hbar\omega, E_n - 2 \cdot \hbar\omega, E_n - 3 \cdot \hbar\omega, \mathbf{K}$ .

Diese Folge muss bei  $E_n - n \cdot \hbar\omega = E_0$  abbrechen, denn die kleinste mögliche Energie ist  $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$  mit der zugehörigen Wellenfunktion  $y_0(x)$  sowie  $d^+y_0(x) = 0$ , so dass die weitere Anwendung von  $d^+$  auf  $y_0(x)$  keine neuen Wellenfunktionen, sondern nur Nullen erzeugt.

**Ergebnis: Der quantenmechanische harmonische Oszillator im Parabelpotential kann nur Zustände mit bestimmter Energie  $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$  ( $n = 0, 1, 2, 3, \mathbf{K}$ ) annehmen. Man spricht von einem diskreten Energiespektrum des Quantenobjektes. Die Zahlen  $n$  heißen Energiequantenzahlen, die Energie gequantelt.**

**Die Differenz zwischen zwei Energiestufen beträgt**

$$E_{n+1} - E_n = \left(n + 1 + \frac{1}{2} - \left(n + \frac{1}{2}\right)\right) \cdot \hbar\omega = \hbar\omega.$$

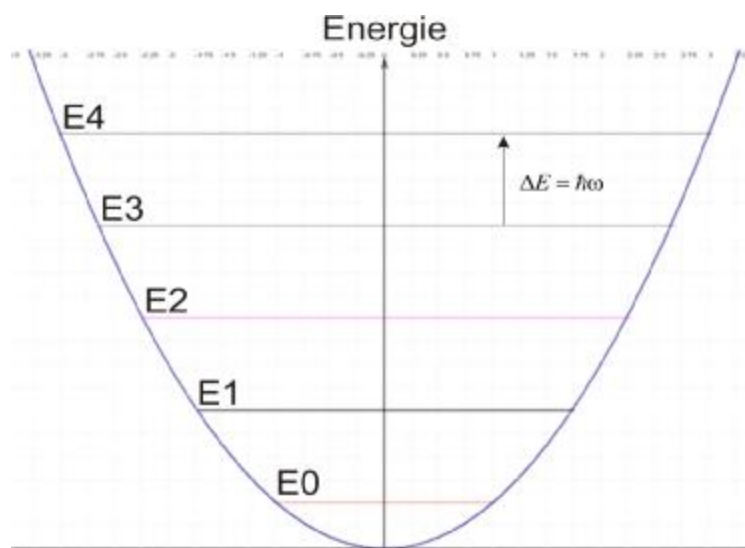


Abb. 2 Die äquidistanten Energiestufen des harmonischen Oszillators im Parabelpotential

Damit ist Plancks Quantenhypothese aus dem Jahre 1900 durch die Quantentheorie nach dem Schrödingerbild bestätigt worden:

Es sollen nun die Wellenfunktionen der ersten drei angeregten Zustände berechnet werden. Durch wiederholte Anwendung des hier hergeleiteten Verfahrens kann dann der geneigte Leser die weiteren Wahrscheinlichkeitsamplituden bestimmen.



**Behauptung:** Durch  $n$ -fache Anwendung des Operators  $d^-$  auf die Wellenfunktion  $y_0$  des Grundzustandes erhält man die Wellenfunktion des  $n$ -ten angeregten Zustandes  $y_n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ), d. h.

$$y_n(x) = \underbrace{(d^- \circ d^- \circ \dots \circ d^-)}_{n \text{ mal}} y_0(x) := (d^-)^n y_0(x).$$

Ich beweise diese Aussage mit Hilfe der vollständigen Induktion:

Induktionsverankerung ( $n=1$ ): Ich muss zeigen, dass die Funktion  $y_1(x) := d^- y_0(x)$  der Schrödinger-Gleichung mit dem Energiewert  $E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega$  genügt.

Mit Hilfe der Vertauschungsregel (VTR) erhalte ich

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} (d^- \circ d^+) d^- y_0(x) &= \frac{1}{2m} d^- ((d^+ \circ d^-) y_0(x)) = \frac{1}{2m} d^- [(2m\hbar\omega + d^- \circ d^+) y_0(x)] = \\ &= \frac{1}{2m} d^- [(2m\hbar\omega y_0(x) + (d^- \circ d^+) y_0(x))] = \frac{1}{2m} d^- [(2m\hbar\omega y_0(x) + d^- (d^+ y_0(x)))] . \end{aligned}$$

Nun ist  $d^+ y_0(x) = 0$  (vgl. Seite 5), so dass

$$\frac{1}{2m} (d^- \circ d^+) d^- y_0(x) = \frac{1}{2m} d^- (2m\hbar\omega y_0(x)) = \hbar\omega d^- y_0(x) = \hbar\omega y_1(x) = \left(\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{1}{2}\hbar\omega\right) y_1(x)$$

gilt, was zu beweisen war.

Induktionsschluss: Die Behauptung gelte für alle  $n \leq m$ . Zu zeigen ist, dass sie dann auch für  $m+1$  gilt.

Seien also  $y_m(x) = (d^-)^m y_0(x)$  der  $m$ -te angeregte Zustand und  $E_m = \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$  der dazu gehörige Energiewert. Dann gilt nach Induktionsvoraussetzung:

$$\frac{1}{2m} (d^- \circ d^+) y_m(x) = \left(E_m - \frac{1}{2}\hbar\omega\right) \cdot y_m(x). \quad (5)$$

Nun sei  $y_{m+1}(x) := (d^-)^{m+1} y_0(x) = (d^- \circ (d^-)^m) y_0(x) = d^- ((d^-)^m y_0(x)) = d^- y_m(x)$ .

Daraus folgt

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} (d^- \circ d^+) ((d^-)^{m+1} y_0(x)) &= \frac{1}{2m} (d^- \circ d^+ \circ d^-) ((d^-)^m y_0(x)) = \frac{1}{2m} (d^- \circ (d^+ \circ d^-)) y_m(x) \\ &= \frac{1}{2m} (d^- \circ (d^+ \circ d^-)) y_m(x) = \frac{1}{2m} (d^- \circ (2m\hbar\omega + d^- \circ d^+)) y_m(x) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2m} \left[ 2m\hbar\omega d^- y_m(x) + (d^- \mathbf{o} (d^- \mathbf{o} d^+)) y_m(x) \right] \\
&= \hbar\omega y_{m+1}(x) + \frac{1}{2m} d^- \mathbf{o} (d^- \mathbf{o} d^+) y_m(x) = \hbar\omega y_{m+1}(x) + d^- \left[ \frac{1}{2m} (d^- \mathbf{o} d^+) y_m(x) \right] \\
&= \hbar\omega y_{m+1}(x) + d^- \left[ \frac{1}{2m} (d^- \mathbf{o} d^+) y_m(x) \right] = \hbar\omega y_{m+1}(x) + d^- \left[ \left( E_m - \frac{1}{2} \hbar\omega \right) y_m(x) \right] \\
&= \hbar\omega y_{m+1}(x) + d^- \left[ \left( E_m - \frac{1}{2} \hbar\omega \right) y_m(x) \right] = \hbar\omega y_{m+1}(x) + \left( E_m - \frac{1}{2} \hbar\omega \right) d^- y_m(x) \\
&= \hbar\omega y_{m+1}(x) + \left( E_m - \frac{1}{2} \hbar\omega \right) y_{m+1}(x)
\end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\frac{1}{2m} (d^- \mathbf{o} d^+) y_{m+1}(x) = \left( E_m + \hbar\omega - \frac{1}{2} \hbar\omega \right) y_{m+1}(x) = \left( E_{m+1} - \frac{1}{2} \hbar\omega \right) y_{m+1}(x),$$

d. h. die Funktion  $y_{m+1}(x) = (d^-)^{m+1} y_0(x)$  erfüllt die Schrödinger-Gleichung mit dem Energiewert

$$E_{m+1} = E_m + \hbar\omega = \left( m + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \hbar\omega = \left( (m+1) + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega. \quad \mathbf{W}$$

Sukzessive Anwendung dieses Algorithmus liefert die folgenden Wellenfunktionen der ersten 5 angeregten Zustände, wobei die Normierungsfaktoren  $N_u$  in der Tabelle so zu wählen sind,

$$\text{dass } \int_{-\infty}^{\infty} y_u^2(x) dx = 1 \text{ bzw. } \int_{-\infty}^{\infty} y_u^2(x) dx = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (5) \text{ gilt.}$$

$u$	$E_v$	$y_u(x)$
0	$\frac{1}{2}\hbar\omega$	$N_0 \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$
1	$\frac{3}{2}\hbar\omega$	$N_1 \cdot 2x \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$
2	$\frac{5}{2}\hbar\omega$	$N_2 \cdot (4x^2 - 2) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$
3	$\frac{7}{2}\hbar\omega$	$N_3 \cdot (8x^3 - 12x) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$
4	$\frac{9}{2}\hbar\omega$	$N_4 \cdot (16x^4 - 48x^2 + 12) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$
5	$\frac{11}{2}\hbar\omega$	$N_5 \cdot (32x^5 - 160x^3 + 120x) \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$

Die ganzrationalen, symmetrischen Faktoren  $H_u(x)$  der Exponentialfunktion  $\exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$  heißen Hermitesche Polynome vom Grade  $u$ .

Sie sind durch die Bestimmungsgleichung

$$H_u(x) = (-1)^u \cdot \exp(x^2) \cdot \frac{d^u}{dx^u} (\exp(-x^2)), \quad u = 0, 1, 2, \mathbf{K} \quad (6)$$

definiert (siehe Lehrbücher über Differentialgleichungen).

Setzt man  $y_u(x)$  in die Normierungsbedingung (5) ein, so erhält man

$$N_u^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_u^2(x) \cdot \exp(-x^2) dx = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}. \text{ Ersetzt man einen der beiden Faktoren } H_u(x) \text{ durch die}$$

Bestimmungsgleichung (6), so folgt

$$N_u^2 \cdot (-1)^u \int_{-\infty}^{\infty} H_u(x) \cdot \frac{d^u}{dx^u} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

Führt man nacheinander  $u$  partielle Integrationen aus, um die Ableitungen zu exterminieren, so reduziert sich wegen  $\frac{d^u}{dx^u} H_u(x) = 2^u \cdot u!$

(man beachte:  $H_u(x) = (2x)^u + a_{u-2}x^{u-2} + \mathbf{K}$ ) der erste Faktor unter dem Integral zu einer Konstanten, so dass

$$N_u^2 \cdot 2^u u! \sqrt{p} = \sqrt{\frac{mW}{\hbar}}, \text{ also } N_u = (2^u u!)^{-\frac{1}{2}} \cdot \left(\frac{mW}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \text{ gilt.}$$

Das Parabelpotential ist achsensymmetrisch. Eine Spiegelung des Potentials (Austausch von  $x$  durch  $-x$ ) darf aus Symmetriegründen an der Physik nichts ändern. Diese Invarianz gegenüber Spiegelung zieht Symmetrien der Wellenfunktionen nach sich: Aus  $y^2(x) = y^2(-x)$  folgt  $y(x) = \pm y(-x)$ .

Ist  $y(x) = +y(-x)$ , so sagt man, die Zustandsfunktion habe *gerade Parität*.

Gilt dagegen  $y(x) = -y(-x)$ , so spricht man von *ungerader Parität*.

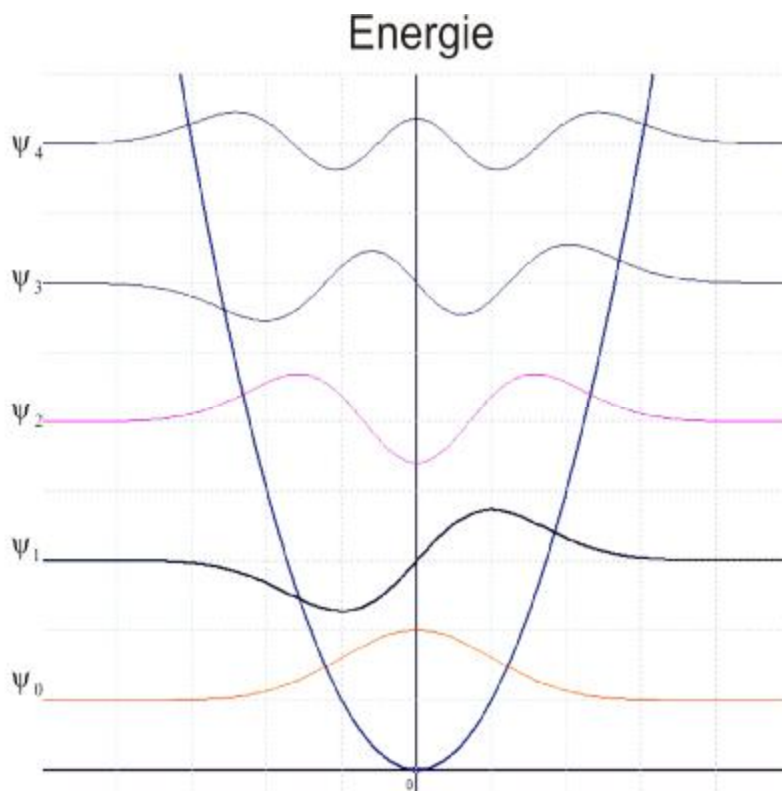


Abb. 3. Die ersten Wellenfunktionen im Parabelpotential des harmonischen Oszillator

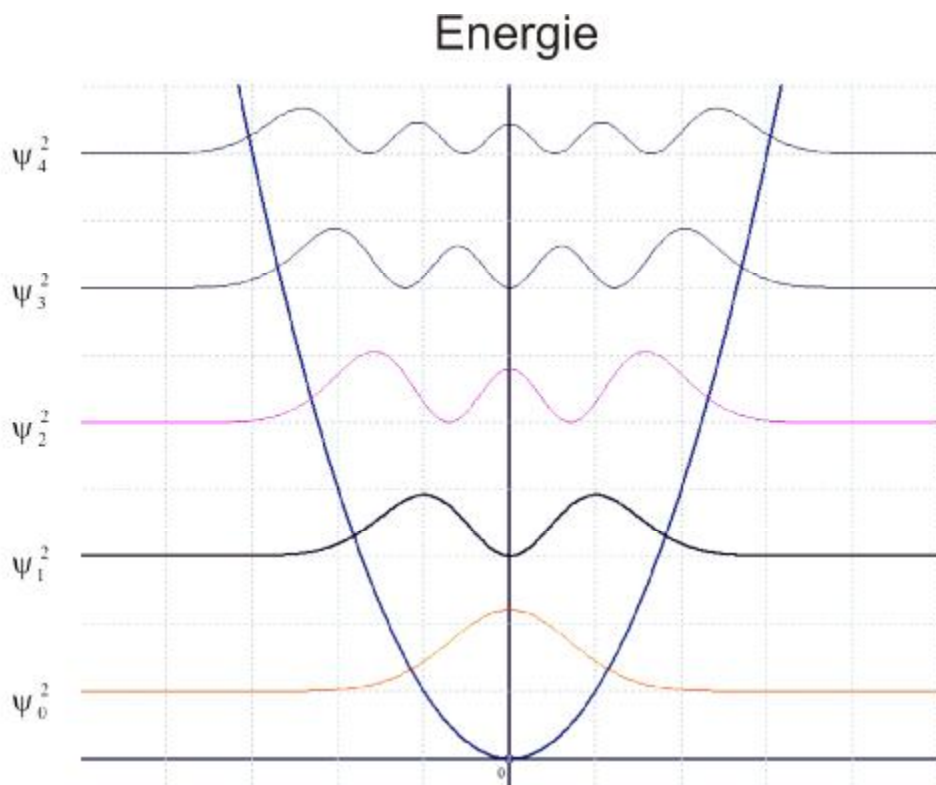


Abb. 4.: Die quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsdichte für die ersten Schwingungsquantenzahlen

In der klassischen Physik sind die erlaubten Aufenthaltsbereiche des Oszillators mit der Amplitude  $A$  durch die Bedingung  $|x| \leq A$  eingeschränkt, bzw. durch die Gleichung  $E = E_{pot}$  für die Umkehrpunkte festgelegt.

Mit  $x(t) = A \cos \omega t$  und  $p(t) = m \frac{dx}{dt} = -A m \omega \sin \omega t$  erhält man

$$E_u = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 A_u^2, \text{ so dass } A_u = \sqrt{\frac{2E_u}{m\omega^2}} \text{ gilt.}$$

Der klassisch verbotene Bereich wird demnach durch  $|x| > \sqrt{\frac{2E_u}{m\omega^2}}$  beschrieben.

Wie die Abbildungen 3, 4 und 5 zeigen, „tunnelt“ das quantenmechanische Teilchen in den Umkehrpunkten über den klassisch erlaubten Bereich hinaus, d. h. Quantenobjekte können in Gebiete eindringen, die klassischen Teilchen aus energetischen Gründen verboten sind.

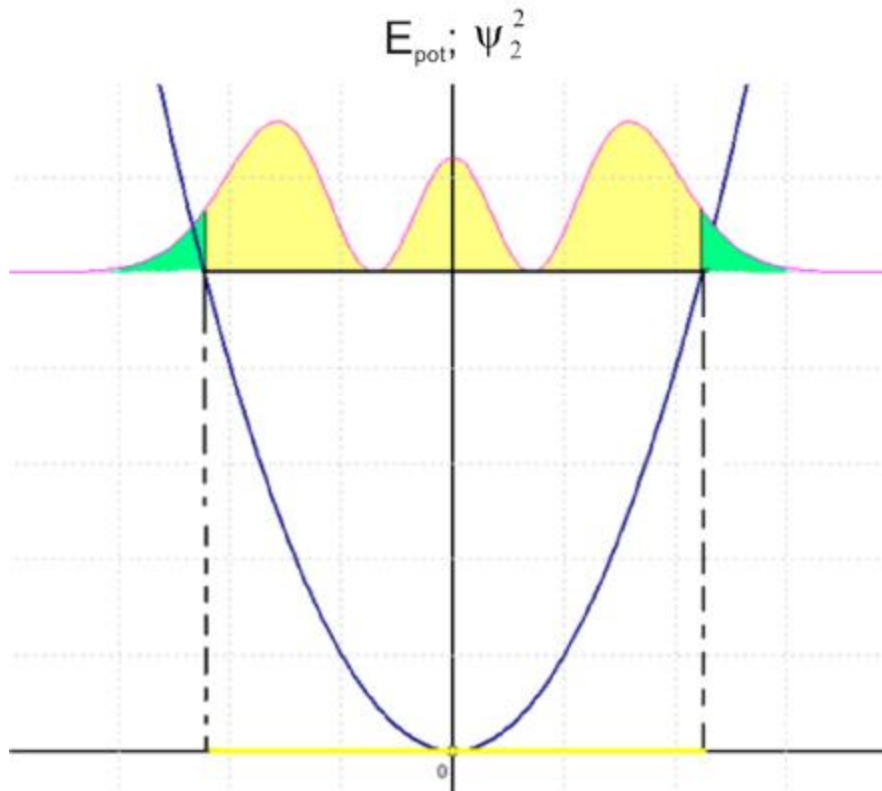


Abb. 5 Wahrscheinlichkeitsdichte  $y_2^2$  des dritten stationären Zustandes. Die gelbe Strecke stellt den klassisch erlaubten Bereich dar

Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen in einem klassisch nicht erlaubten Bereich zu finden ist, unter Berücksichtigung der Symmetrieeigenschaften sowie der Normierung der Wellenfunktionen,

$$P_u = \int_{-\infty}^{-A_u} y_u^2(x) dx + \int_{A_u}^{\infty} y_u^2(x) dx = 2 \cdot \int_{A_u}^{\infty} y_u^2(x) dx = 1 - 2 \cdot \int_0^{A_u} y_u^2(x) dx.$$

Mit  $A_u = \sqrt{\frac{2E_u}{m\omega^2}} = \sqrt{\frac{2 \cdot \left(u + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega}{m\omega^2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{2u+1}$  und der Substitution  $x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x := V \cdot x$

erhält man

$$P_u = 1 - \frac{2}{V} \int_0^{\sqrt{2u+1}} y_u^2(x) dx = 1 - \frac{2}{V} N_u^2 \cdot \int_0^{\sqrt{2u+1}} H_u^2(x) \cdot \exp(-x^2) dx.$$

$$\text{also } P_u = 1 - \frac{1}{2^{u-1} u! \sqrt{\pi}} \cdot \int_0^{\sqrt{2u+1}} H_u^2(x) \cdot \exp(-x^2) dx.$$

Die numerische Auswertung der Integrale liefert:

$$P_0 = 1 - \frac{2}{\sqrt{p}} \int_0^1 \exp(-x^2) dx \approx 0,1573 \approx 15,7\%$$

$$P_1 = 1 - \frac{4}{\sqrt{p}} \int_0^{\sqrt{3}} x^2 \cdot \exp(-x^2) dx \approx 0,1116 \approx 11,2\%$$

$$P_2 = 1 - \frac{1}{\sqrt{p}} \int_0^{\sqrt{5}} (2x^2 - 1)^2 \cdot \exp(-x^2) dx \approx 0,0951 \approx 9,5\%$$

$$P_3 = 1 - \frac{2}{3\sqrt{p}} \int_0^{\sqrt{7}} x^2 \cdot (2x^2 - 3)^2 \cdot \exp(-x^2) dx \approx 0,0855 \approx 8,6\%$$

$$P_4 = 1 - \frac{1}{12\sqrt{p}} \int_0^3 (4x^4 - 12x^2 + 3)^2 \cdot \exp(-x^2) dx \approx 0,079 = 7,9\%$$

$$P_5 = 1 - \frac{1}{30\sqrt{p}} \int_0^{\sqrt{11}} x^2 \cdot (4x^4 - 20x^2 + 15)^2 \cdot \exp(-x^2) dx \approx 0,074 = 7,4\%$$

Es zeigt sich, dass die Zahlenwerte von  $P_u$  für höhere Energiestufen immer kleiner werden. Die Wahrscheinlichkeit der Teilchen, sich in klassisch verbotenen Bereichen aufzuhalten, nimmt daher streng monoton ab. Bei großen Quantenzahlen  $u$  nähert sich demnach der quantenmechanische Aufenthaltsbereich immer mehr dem klassischen an, d. h. bei großen Quantenzahlen nähert sich das atomare Geschehen asymptotisch dem Erscheinungsbild der klassischen Physik, oder, wie N. Bohr es in seinen so genannten Korrespondenzprinzip ausdrückt, „die Gesetze der Mikrophysik gehen beim Übergang zu makroskopischen Dimensionen in die Gesetze der Makrophysik über“.

Die Wahrscheinlichkeit  $P_{kl}(x)$ , ein klassisches Teilchen mit der Amplitude  $A$  und der Schwingungsdauer  $T = \frac{2p}{w}$  während des Zeitintervalls  $dt$  im Ortsintervall  $[x, x + dx]$  zu finden, ist

$$P_{kl}(x) = \frac{dt}{T} = \frac{dx}{|v(x)| \cdot T},$$

wobei das schwingende Teilchen in der Zeit  $dt$  die Strecke  $dx = v(x) \cdot dt$  zurücklegt. In der Nähe der Umkehrpunkte ist die Geschwindigkeit klein, so dass dort  $P(x)$  groß ist. Beim Durchgang durch die Ruhelage ist die Wahrscheinlichkeit  $P(x)$  minimal, da dort die Geschwindigkeit des Teilchens maximal ist.

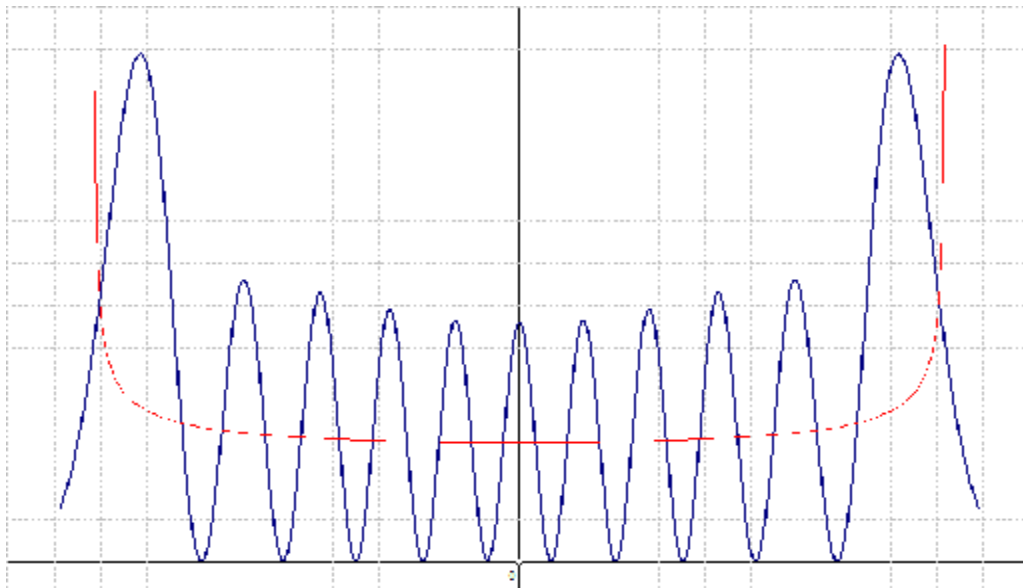


Abb. 6 Klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit (rote Kurve) als Mittelwert der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsdichte (blaue Kurve) für die Quantenzahl  $u = 10$ . (Abszissen in Einheiten von  $x$ ).

Die Abbildung 6 zeigt, dass die quantenmechanische Beschreibung für große Quantenzahlen das Ergebnis der klassischen Physik bestätigt: Die klassische Rechnung gibt den Mittelwert der quantenmechanischen Dichte  $y^2(x)$  an. Dabei ist zu beachten, dass die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Gegensatz zur quantenmechanischen nicht null werden kann.

Aus  $x(t) = A_u \cos \omega t$  und  $v(t) = -A_u \omega \sin \omega t$  folgt

$$|v(x)| = A_u \omega \cdot \sin \left( \arccos \frac{x}{A_u} \right) = A_u \omega \sqrt{1 - \cos^2 \left( \arccos \frac{x}{A_u} \right)} = \omega \cdot \sqrt{A_u^2 - x^2}, \text{ so dass}$$

$$P_{kl}(x, u) = \frac{dx}{2p \sqrt{(2u+1) - x^2}} \text{ gilt.}$$

$$\text{Wegen } \int_{-\sqrt{2u+1}}^{\sqrt{2u+1}} \frac{dx}{2p \sqrt{(2u+1) - x^2}} = \frac{1}{2p} \cdot \left[ \arcsin \frac{x}{\sqrt{2u+1}} \right]_{-\sqrt{2u+1}}^{\sqrt{2u+1}} = \frac{1}{2p} \cdot \left( \frac{p}{2} + \frac{p}{2} \right) = \frac{1}{2}$$

ist die klassische Wahrscheinlichkeit, das Teilchen während einer Halbperiode der Schwingung anzutreffen, gleich 0,5.

Für die niedrigste Quantenzahl  $u = 0$ , also im tiefsten Quantenzustand, unterscheiden sich klassische und quantenmechanische Beschreibung völlig:

Die klassische Wahrscheinlichkeit ist an den Umkehrpunkten maximal und für  $x = 0$  minimal, die quantenmechanische dagegen an den Umkehrpunkten relativ klein und für  $x = 0$  maximal.



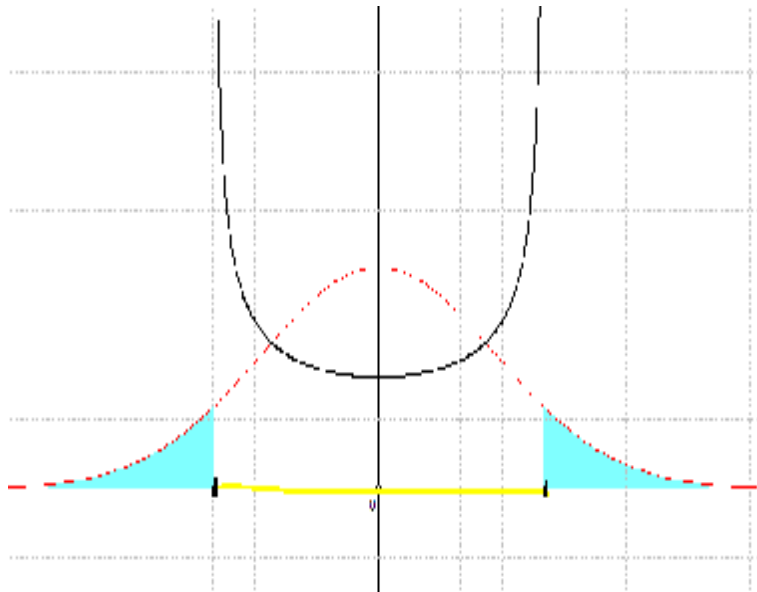


Abb. 7 Klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit (schwarze Kurve) und quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsdichte (rote Kurve) für die Quantenzahl  $u = 0$ . (Abszissen in Einheiten von  $X$ ). Die gelbe Strecke stellt den klassisch erlaubten Bereich dar

## Anhang:

Begründung der Forderung  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x, t) = 0$ :

Gemäß der statistischen Interpretation der Quantenmechanik nach Max Born gibt die Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  in der Schrödinger-Theorie die Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das Teilchen in Raum und Zeit an.

Genauer: Das Quadrat der absoluten Werte der Wellenfunktion ist der Wahrscheinlichkeitsdichte proportional. Das heißt, die Wahrscheinlichkeit, dass das Mikroteilchen zum Zeitpunkt  $t$  innerhalb der Intervalls  $(a, b)$  nachgewiesen werden kann, ist  $P(a, b) = c \cdot \int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx$  (1),

wobei  $c$  eine von  $x$  unabhängige Konstante ist. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo nachzuweisen, muss gleich eins sein:  $1 = c \cdot \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx$ .

Angenommen, das Integral divergiert. Dann muss  $c \equiv 0$  sein. Aus Gleichung (1) folgt dann das physikalisch sinnlose Ergebnis, dass das Teilchen nirgendwo nachgewiesen werden kann. Daraus folgt, dass die Wellenfunktion für alle Werte von  $t$  eine quadratisch integrierbare Funktion sein muss. Dann kann man eine neue Wellenfunktion  $\psi_{norm}(x, t) = \sqrt{c} \cdot \psi(x, t)$  definieren,

so dass  $1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{norm}(x, t)|^2 dx$  (2) bzw.  $P(a, b) = \int_a^b |\psi_{norm}(x, t)|^2 dx$  gilt.

Den Normierungsfaktor  $c$  erhält man aus  $\frac{1}{c} = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx < \infty$ .

Wellenfunktionen, die der Bedingung (2) genügen, heißen normierte Wellenfunktionen. Solche „auf eins normierte Wellenfunktionen“ sind für das Rechnen vorteilhaft, da ihr Absolutquadrat nicht nur proportional zur Wahrscheinlichkeitsdichte, sondern gleich dieser ist.

Wenn mit  $y(x,t)$  auch  $y_{norm}(x,t)$  eine Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2} + V(x) \cdot y(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} y(x,t) \quad (3)$$

sein soll, darf  $c$  nicht von der Zeit  $t$  abhängen!

Satz: Die Funktion  $y(x,t)$  genüge den folgenden Bedingungen:

1.  $y(x,t)$  ist eine Lösung der Schrödinger-Gleichung (3)
2.  $y(x,t)$  ist quadratisch integrierbar,
3.  $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} y(x,t) = 0$ ,
4. die Ableitung von  $y(x,t)$  nach  $x$  ist beschränkt.

Dann gilt  $\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |y(x,t)|^2 dx = 0$ , so dass die Normierungskonstante  $c$  unabhängig von der Zeit  $t$  ist.

Beweis:

$$\frac{\partial}{\partial t} |y(x,t)|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\bar{y} \cdot y) = \bar{y} \cdot \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial \bar{y}}{\partial t} \cdot y.$$

Mit (3) erhält man

$$\frac{\partial}{\partial t} y = -\frac{i}{\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} y_{xx} + V(x)y \right) = \frac{\hbar}{2m} i y_{xx} - \frac{i}{\hbar} V(x)y \quad \text{und, da das Potential } V(x) \text{ reell ist,}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{y} = -\frac{\hbar}{2m} i \bar{y}_{xx} + \frac{i}{\hbar} V(x)\bar{y}.$$

Daraus folgt

$$\frac{\partial}{\partial t} |y(x,t)|^2 = \bar{y} \cdot \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial \bar{y}}{\partial t} \cdot y = \frac{i\hbar}{2m} (\bar{y} y_{xx} - y \bar{y}_{xx}) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} (\bar{y} y_x - y \bar{y}_x).$$

Integration liefert

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} |y(x,t)|^2 dx = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |y(x,t)|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} [(\bar{y} y_x - y \bar{y}_x)]_{-\infty}^{\infty} = 0. \quad \mathbf{W}$$