IV.2 Eindimensionaler harmonischer Oszillator

Als nächstes Beispiel betrachten wir den Fall eines Teilchens mit Masse m im Potential

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \quad \text{mit} \quad \omega > 0, \tag{IV.27}$$

das klassisch einen *harmonischen Oszillator* mit Kreisfrequenz ω beschreibt.

IV.2.1 Analytische Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung

IV.2.1 a Eigenwerte und -funktionen des eindimensionalen harmonischen Oszillators

Mit dem Potential (IV.27) lautet die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_E(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi_E(x) = E\psi_E(x). \tag{IV.28}$$

Unter Einführung der dimensionslosen Variablen

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \tag{IV.29a}$$

und

$$\varepsilon \equiv \frac{E}{\frac{1}{2}\hbar\omega} \tag{IV.29b}$$

nimmt die stationäre Schrödinger-Gleichung (IV.28) die dimensionslose Form

$$-\frac{\mathrm{d}^2\psi_\varepsilon(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2} + \xi^2\psi_\varepsilon(\xi) = \varepsilon\psi_\varepsilon(\xi) \tag{IV.30}$$

an, wobei die unbekannte Funktion unbenannt wurde: $\psi_\varepsilon(\xi) = \psi_E(x)$. Dabei handelt es sich um lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung: für jeden $\varepsilon \in \mathbb{R}$ existieren zwei linear unabhängige Lösungen auf $\mathbb{R}$, und jede Linearkombination davon ist auch Lösung für den gleichen Wert von ε.

Physikalisch sind aber nur quadratintegrable Lösungen passend. Wie wir im § IV.2.1 c unten sehen werden, existieren solche nur wenn ε der Form

$$\varepsilon_n = 2n + 1 \quad \text{mit } n \in \mathbb{N} \tag{IV.31a}$$

ist, d.h. nur für abzählbar viele diskrete Werte von ε. Die zugehörigen Lösungen der dimensionslosen Differentialgleichung (IV.30) lauten

$$\psi_{\varepsilon_n}(\xi) = CH_n(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \quad \text{mit } C \in \mathbb{C}, \tag{IV.31b}$$

wobei H_n das n-te *Hermitesche Polynom* ist.[19] Beispielsweise lauten die ersten vier Hermiteschen Polynome

$$H_0(\xi) = 1 \quad , \quad H_1(\xi) = 2\xi \quad , \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 \quad , \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \quad , \quad \ldots \tag{IV.32}$$

Kommt man nun zurück zu den dimensionsbehafteten Größen, so sind die Eigenenergien des eindimensionalen harmonischen Oszillators

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad \text{mit } n \in \mathbb{N}} \tag{IV.33a}$$

und die zugehörigen, auf 1 normierten Wellenfunktionen

$$\boxed{\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n\!\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\mathrm{e}^{-m\omega x^2/2\hbar}.} \tag{IV.33b}$$

[19] Einige Einschaften dieser Polynome werden im Anhang B.1 dargelegt.

IV.2.1 b Eigenschaften

In diesem Paragraph werden einige Eigenschaften der Eigenelemente (IV.33) der stationären Schrödinger-Gleichung für den eindimensionalen harmonischen Operator aufgelistet.

- Laut Gl. (IV.33a) ist das Energiespektrum diskret — obwohl die Ortsvariable x jeden reellen Wert annehmen kann, so dass der Hilbert-Raum des Oszillators unendlichdimensional ist.

  Jede Funktion von x kann als Linearkombination der Eigenfunktionen $\{\psi_n(x)\}_{n\in\mathbb{N}}$ geschrieben werden, auch wenn diese nur abzählbar ist: die Eigenfunktionen bilden eine *Hilbert-Basis*.

- Die sukzessiven Energieniveaus E_n sind äquidistant und jedes Niveau ist nicht entartet.

  Die „zweite“ Lösung der Differentialgleichung (IV.28) mit der gleichen Energie E_n ist nicht normierbar.

- Der Grundzustand hat eine nicht-verschwindende *Nullpunktenergie* $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$.

- Die Eigenfunktionen sind alternativ gerade und ungerade: $\psi_n(-x) = (-1)^n\psi_n(x)$, wie man am Beispiel der fünf ersten Eigenfunktionen in Abb. IV.4 sieht.

- $\psi_n(x)$ hat genau n Nullstellen.

  Beide Eigenschaften gelten schon für die Hermiteschen Polynome $H_n(x)$.

- Da die Eigenfunktionen entweder gerade oder ungerade sind, ist deren Betragsquadrat immer gerade. Daraus folgt, dass die Erwartungswerte von Position und Impuls in einem beliebigen Energieeigenzustand ψ_n verschwinden:

$$\langle x\rangle_{\psi_n} = 0 \quad \text{und} \quad \langle p\rangle_{\psi_n} = 0. \tag{IV.34a}$$

  Dazu berechnet man noch

$$\langle x^2\rangle_{\psi_n} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega} \tag{IV.34b}$$

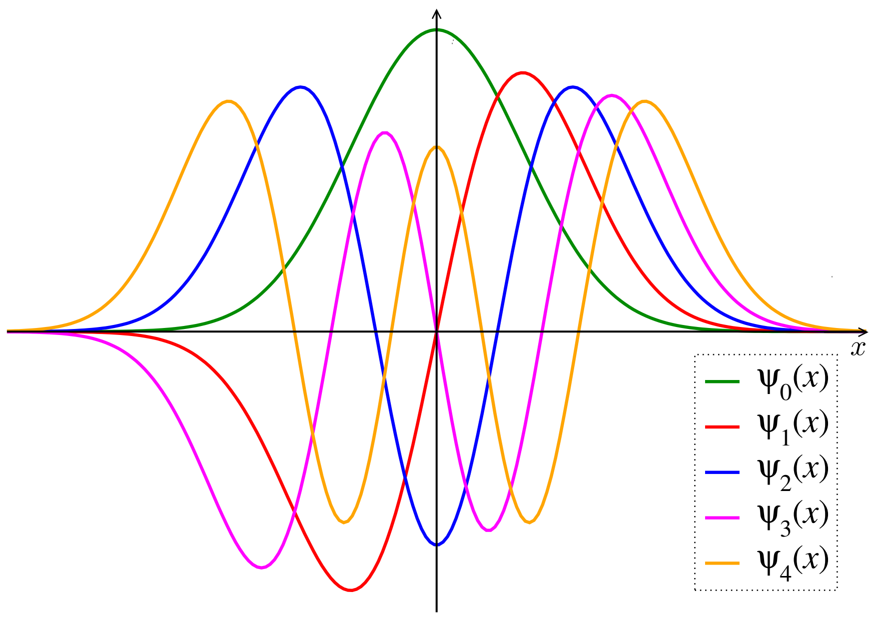

Abbildung IV.4 – Wellenfunktionen (IV.33b) der fünf niedrigsten Energieniveaus des eindimensionalen harmonischen Oszillators.

und

$$\langle p^2\rangle_{\psi_n} = \left(n+\frac{1}{2}\right)m\hbar\omega. \tag{IV.34c}$$

Beweis: später! (Aufgabe?)

Da $(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle$ und $(\Delta p)^2 = \langle p^2\rangle$ hier gelten, lautet die Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation im Energieeigenzustand ψ_n

$$(\Delta x)_{\psi_n}(\Delta p)_{\psi_n} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar \;\geq\; \frac{\hbar}{2} \quad \forall n\in\mathbb{N}. \tag{IV.34d}$$

Dabei merkt man, dass die Nullpunktenergie nötig ist, damit die Ungleichung auch im Grundzustand gilt.

Bemerkung: Gleichung (IV.34b) besagt auch, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi_n(x)|^2$ mit wachsendem n breiter wird und weiter weg von $\langle x\rangle = 0$ lokalisiert ist, vgl. Abb. IV.5.

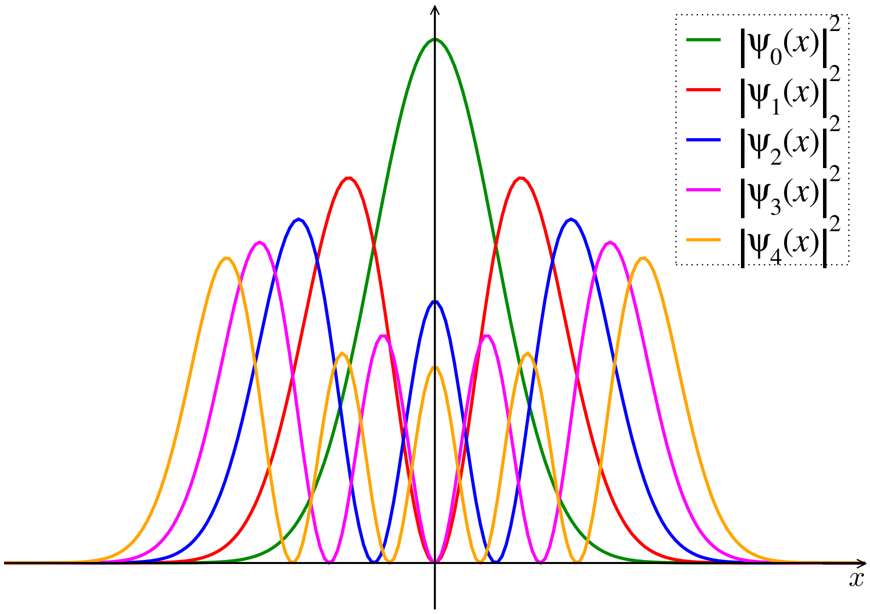

Abbildung IV.5 – Aufenthaltswahrseinlichkeiten für die fünf niedrigsten Energieniveaus des eindimensionalen harmonischen Oszillators.

IV.2.1 c Herleitung der normierbaren Lösungen

Im Limes $\xi \gg \sqrt{\varepsilon}$ bei festem $\varepsilon\in\mathbb{R}$ ist der Term in der rechten Seite von Gl. (IV.30) vernachlässigbar gegenüber dem zweiten Term im rechten Glied, so dass

$$-\frac{\mathrm{d}^2\psi_\varepsilon(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2} + \xi^2\psi_\varepsilon(\xi) \approx 0 \quad\Leftrightarrow\quad \frac{\mathrm{d}^2\psi_\varepsilon(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2} \approx \xi^2\psi_\varepsilon(\xi) \tag{IV.35}$$

gelten muss. Die Lösungen dieser (approximativen) Differentialgleichung sind der Form

$$A\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2} + B\,\mathrm{e}^{\xi^2/2} \quad \text{mit} \quad A,B\in\mathbb{C}.$$

Dabei werden die Lösungen, die sich wie $\mathrm{e}^{\xi^2/2}$ verhalten, nicht quadratintegrabel sein, und somit uninteressant für das *physikalische* Problem unter Betrachtung. Das heißt, dass die physikalisch relevanten Lösungen für großes ξ wie $\psi_\varepsilon(\xi) \propto \mathrm{e}^{-\xi^2/2}$ nach 0 gehen sollten. Dementsprechend werden Lösungen von Gl. (IV.30) der Form

$$\psi_\varepsilon(\xi) = \chi_\varepsilon(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \tag{IV.36}$$

gesucht. Unter Nutzung der Produkt- und Kettenregeln findet man für die ersten zwei Ableitungen von ψ_ε

$$\psi'_\varepsilon(\xi) = \big[\chi'_\varepsilon(\xi) - \xi\chi_\varepsilon(\xi)\big]\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \quad , \quad \psi''_\varepsilon(\xi) = \big[\chi''_\varepsilon(\xi) - 2\xi\chi'_\varepsilon(\xi) + (\xi^2-1)\chi_\varepsilon(\xi)\big]\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2}.$$

Das Einsetzen dieser $\psi_\varepsilon(\xi)$ und $\psi''_\varepsilon(\xi)$ in die Differentialgleichung (IV.30) ergibt

$$-\big[\chi''_\varepsilon(\xi) - 2\xi\chi'_\varepsilon(\xi) + (\xi^2-1)\chi_\varepsilon(\xi)\big]\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2} + \xi^2\chi_\varepsilon(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2} = \varepsilon\chi_\varepsilon(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$

d.h., nach Division durch den immer nicht-verschwindenden Faktor $\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$ und einiger Umschreibung

$$\chi''_\varepsilon(\xi) - 2\xi\chi'_\varepsilon(\xi) + (\varepsilon-1)\chi_\varepsilon(\xi) = 0. \tag{IV.37}$$

Diese lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung heißt *Hermitesche-Differentialgleichung*.

Um deren Lösungen zu finden, kann man die Frobenius[(aa)]-Methode benutzen, d.h. einen Taylor-Reihen-Ansatz

$$\chi_\varepsilon(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k\xi^k, \tag{IV.38}$$

mit komplexen Koeffizienten a_k betrachten. Sukzessive Ableitungen liefern

$$\chi'_\varepsilon(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} k a_k\xi^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty}(k+1)a_{k+1}\xi^k,$$

und

$$\chi''_\varepsilon(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} k(k+1)a_{k+1}\xi^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty}(k+1)(k+2)a_{k+2}\xi^k.$$

Diese Taylor-Reihen können dann in die Hermitesche Differentialgleichung eingesetzt werden:

$$\sum_{k=0}^{\infty}\big[(k+1)(k+2)a_{k+2} - 2ka_k + (\varepsilon-1)a_k\big]\xi^k = 0. \tag{IV.39}$$

Da die Nullfunktion auf der rechten Seite eine Taylor-Entwicklung mit identisch verschwindenden Koeffizienten hat, folgt aus der Eindeutigkeit der Taylor-Reihe

$$(k+1)(k+2)a_{k+2} - 2ka_k + (\varepsilon-1)a_k = 0 \quad \forall k\in\mathbb{N}$$

d.h.

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\varepsilon}{(k+1)(k+2)}a_k \quad \forall k\in\mathbb{N}. \tag{IV.40}$$

Somit erhält man eine Rekursionsformel für die Koeffizienten a_n: die Angabe von komplexen Zahlen a_0 und a_1 bestimmt die ganze Taylor-Reihe für einen bestimmten Wert von ε.

Diese zwei „Freiheitsgrade“ a_0, a_1 entsprechen der Existenz zweier linear unabhängigen Lösungen für jeden ε.

Sei erstens angenommen, dass ε der Form (IV.31a) ist: $\varepsilon = 2n+1$ mit $n\in\mathbb{N}$. Dann folgt aus der Rekursionsformel $a_{n+2} = 0$ und allgemeiner

$$a_k = 0 \quad \text{für alle } k = n+2k' \quad \text{mit} \quad k'\in\mathbb{N}^*.$$

Falls n beispielsweise gerade ist, $n = 2n'$, sind alle geraden Koeffizienten a_{2j} ab $j = n'+1$ Null. Wenn dazu a_1 Null ist, und somit alle ungeraden Koeffizienten a_{2j+1} mit $j\in\mathbb{N}$, besteht die Taylor-Reihe (IV.38) aus nur endlich vielen Termen:

$$\chi_\varepsilon(\xi) = \sum_{j=0}^{n'} a_{2j}\,\xi^{2j},$$

[(aa)] F. F. Frobenius, 1849–1917

d.h. $\chi_\varepsilon(\xi)$ ist ein Polynom in ξ vom Grad n — und genauer das n-te Hermitesche Polynom $H_n(\xi)$. In diesem Fall ist $\psi_\varepsilon(\xi) = \chi_\varepsilon(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$ integrierbar.

Wenn ε nicht der Form $2n+1$ mit $n \in \mathbb{N}$ ist, werden die Koeffizienten a_k nie Null sein. Für große Werte von k führt die Rekursionsformel (IV.40) zu

$$a_{k+2} \approx \frac{2}{k} a_k \quad \text{für } k \gg 1. \tag{IV.41}$$

Daraus folgert man, dass die resultierende Funktion annähernd durch

$$\chi_\varepsilon(\xi) \approx A\,\mathrm{e}^{\xi^2}$$

gegeben ist, so dass die Funktion $\psi_\varepsilon(\xi) = \chi_\varepsilon(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2} \approx A\,\mathrm{e}^{\xi^2/2}$ nicht normierbar ist.

Aus der approximativen Rekursionsformel (IV.41) folgen für die geraden und ungeraden Koeffizienten die jeweiligen Näherungen

$$a_{2j} \approx A_g \frac{2^j}{(2j)(2j-2)\cdots 2} = A_g \frac{2^j}{2^j j!} \approx \frac{A_g}{j!}$$

mit einer Zahl $A_g \in \mathbb{C}$ und ähnlich

$$a_{2j+1} \approx A_u \frac{2^j}{(2j+1)(2j-1)\cdots 3} \approx A_u \frac{2^j}{2^j j!} \approx \frac{A_u}{j!}$$

mit $A_u \in \mathbb{C}$. Damit ergibt sich für die Funktion χ_ε

$$\chi_\varepsilon(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k\,\xi^k = \sum_{j=0}^{\infty} \left(a_{2j}\,\xi^{2j} + a_{2j+1}\,\xi^{2j+1}\right) \approx \sum_{j=0}^{\infty} \frac{A_g}{j!}\xi^{2j} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{A_u}{j!}\xi^{2j+1} = A_g\,\mathrm{e}^{\xi^2} + A_u\,\xi\,\mathrm{e}^{\xi^2},$$

und somit $\chi_\varepsilon(\xi) \gtrsim \mathrm{e}^{\xi^2}$, wenn man sich nur für das grobe Verhalten interessiert.