

## 4 Anwendungen

### 4.4 Analytische Lösung

Wir wollen wieder zurückkehren zur *Schrödingergleichung* und eine *analytische* Lösung von Gl.(1) in Teil 4.1 suchen.

Wir sahen, dass es praktisch ist, sie in dimensionslosen Variablen auszudrücken:

$$z = 1/x_0 \cdot x = (\hbar/m\omega)^{-1/2} \cdot x = (m\omega/\hbar)^{1/2} \cdot x = (mk/\hbar^2)^{1/4} \cdot x$$

(man verwendet auch gern die Variable  $\alpha := 1/x_0^2$ ).

Für den Energieparameter benutzen wir  $w = E/E_0$  mit  $E_0 = \hbar\omega/2$ . Wir erhalten:

$$\psi''(z) + (w - z^2) \cdot \psi(z) = 0 \quad (1)$$

Diese Gleichung (siehe Gl. (4) in Teil 4.1) scheint einfach zu lösen zu sein, aber ganz so einfach ist es nicht. Betrachten wir zuerst den Fall großer Werte von  $|z|$ , d.h. auch von  $|x|$ . Denn für jeden endlichen Wert der Gesamtenergie  $E$  können wir immer einen  $x$ -Wert finden, der groß genug ist, um  $w = E/E_0$  im Vergleich zu  $z^2$  vernachlässigbar klein zu machen. Gl. (1) geht also über in

$$\psi''(z) = z^2 \cdot \psi(z), \quad |z| \rightarrow \infty \quad (2)$$

Die allgemeine Lösung dieser Differentialgleichung ist

$$\psi(z) = A \exp(-z^2/2) + B \exp(z^2/2) \quad (3)$$

(Vgl. Teil 2.1, Gl. (13)).  $A$  und  $B$  sind beliebige Konstanten.

Wenn wir die Ableitungen  $\psi'$  und  $\psi''$  bestimmen, können wir bestätigen, dass Gl. (3) eine Lösung von Gl. (2) ist. Wir erhalten

$$\psi''(z) = A(z^2 - 1) \exp(-z^2/2) + B(z^2 + 1) \exp(z^2/2)$$

Für  $|z| \rightarrow \infty$  ist dies im Wesentlichen gleich

$$\psi''(z) = z^2 (A \exp(-z^2/2) + B \exp(z^2/2)) = z^2 \cdot \psi(z),$$

was Gl. (2) identisch erfüllt.

Da die Eigenfunktionen für  $|z| \rightarrow \infty$  endlich bleiben müssen für, ist es klar, dass B in Gl.(3) verschwinden muss. Also muss die Gestalt der Eigenfunktionen für große Werte von  $|z|$  folgendermaßen aussehen

$$\psi(z) = A \exp(-z^2/2), \quad |z| \rightarrow \infty \quad (4)$$

Um diese Lösung auch auf kleine Werte von  $|z|$  auszudehnen, führen wir die Funktion  $H(z)$  ein in der Hoffnung, dass die Beziehung

$$\psi(z) = A \exp(-z^2/2) \cdot H(z) \quad (5)$$

akzeptable Wellenfunktionen auf ganz  $-\infty < z < +\infty$  liefern wird.

Um  $H(z)$  zu bestimmen, berechnen wir

$$\psi'(z) = -A z \exp(-z^2/2) \cdot H(z) + A \exp(-z^2/2) \cdot H'(z)$$

$$\psi''(z) = A \exp(-z^2/2) (-H(z) + z^2 H(z) - 2z H'(z) + H''(z))$$

Substitution von  $\psi(z)$  und  $\psi''(z)$  in Gl. (1) ergibt

$$A \exp(-z^2/2) (-H(z) + z^2 H(z) - 2z H'(z) + H''(z)) +$$

$$+ w A \exp(-z^2/2) \cdot H(z) - A z^2 \exp(-z^2/2) \cdot H(z) = 0$$

Diese Gleichung kann vereinfacht werden und liefert dann die folgende Differentialgleichung für die Bestimmung von  $H(z)$ :

$$H''(z) - 2z H'(z) + (w - 1)H(z) = 0 \quad (6)$$

Gl. (6) heißt *Hermite'sche* Gleichung nach *Ch.H.Hermite* (1822 - 1901).

Die Untersuchung des Quantenoszillators reduziert sich also auf die Lösung von Gl. (6). Um sie zu lösen, benutzt man die Technik der Potenzreihen mit der unabhängigen Variablen  $z$ . D.h., wir nehmen an, dass gilt

$$H(z) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m z^m = a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + \dots \quad (7)$$

Um die Koeffizienten  $a_0, a_1, a_2, \dots$  zu bestimmen, setzen wir (7) in (6) ein. In den Ableitungen berechnen wir jeden Term einzeln

$$H'(z) = \sum_{1, \infty} m \cdot a_m \cdot z^{m-1} = 1 \cdot a_1 + 2 a_2 z + 3 a_3 z^2 + \dots$$

$$H''(z) = \sum_{2, \infty} (m-1) \cdot m \cdot a_m \cdot z^{m-2} = 1 \cdot 2 a_2 + 2 \cdot 3 a_3 z + 3 \cdot 4 a_4 z^2 + \dots$$

Nach der Substitution nimmt (6) folgende Form an

$$\begin{aligned} & 1 \cdot 2 a_2 + 2 \cdot 3 a_3 z + 3 \cdot 4 a_4 z^2 + 4 \cdot 5 a_5 z^3 + \dots \\ & - 2 \cdot 1 a_1 z - 2 \cdot 2 a_2 z^2 - 2 \cdot 3 a_3 z^3 - \dots \\ & + (w-1) a_0 + (w-1) a_1 z + (w-1) a_2 z^2 + \dots = 0 \end{aligned}$$

Da dies für alle Werte von  $z$  gelten muss, hat die Summe der Koeffizienten für jede Potenz von  $z$  null zu sein

Es gilt demnach

$$\begin{aligned} 1 \cdot 2 a_2 + (w-1) a_0 &= 0 \\ 2 \cdot 3 a_3 + (w-1-2 \cdot 1) a_1 &= 0 \\ 3 \cdot 4 a_4 + (w-1-2 \cdot 2) a_2 &= 0 \\ 4 \cdot 5 a_5 + (w-1-2 \cdot 3) a_3 &= 0 \quad (8) \end{aligned}$$

Für den Koeffizienten von  $z^m$  haben wir die Relation

$$(m+1)(m+2) a_{m+2} + (w-1-2m) a_m = 0$$

oder

$$a_{m+2} = -\frac{(w-1-2m)}{(m+1)(m+2)} \cdot a_m \quad (9)$$

Die Relation (9) ist eine Rekursionsformel, die uns erlaubt, die Koeffizienten der Reihe nach zu berechnen, und zwar die geraden Koeffizienten  $a_2, a_4, a_6, \dots$  in Abhängigkeit von  $a_0$  und die ungeraden  $a_3, a_5, a_7, \dots$  in Funktion von  $a_1$ . Aber (9) sagt nichts aus über  $a_0$  und  $a_1$ . Sie sind bis jetzt unbestimmt, was im übrigen zu erwarten war, denn die allgemeine Lösung der Differentialgleichung zweiter Ordnung (6) muss zwei willkürliche Konstanten haben.

Das bedeutet, dass die allgemeine Lösung zwei unabhängige Reihen enthalten muss.

Wenn  $a_0$  null sein sollte, würde die Reihe (7) nur ungerade Terme enthalten, denn nach (9) wären  $a_2 = a_4 = a_6 = \dots = 0$ . Wenn  $a_1$  null wäre, enthielte (7) nur Terme mit geraden Potenzen, da  $a_3 = a_5 = \dots = 0$ .

Aber in beiden Fällen ergibt sich ein ernsthaftes Problem, denn beide Reihen, die sich mit  $a_0$  oder  $a_1 = 0$  ergeben, verhalten sich wie  $\exp(z^2)$  für große  $m$  – Werte. Das können wir bestätigen, indem wir (7) mit der Entwicklung der Funktion  $\exp(z^2)$  in eine Potenzreihe vergleichen:

$$\exp(z^2) = 1 + z^2 + z^4/2! + z^6/3! + \dots + z^m/(m/2)! + z^{m+1}/(m/2+1)! + \dots \quad (10)$$

Um den Vergleich durchführen zu können, müssen wir für jede Reihe den Quotienten aus den Koeffizienten aufeinanderfolgender Potenzen von  $z$  für große  $m$  bilden. Die Koeffizienten von (7) berechnen wir mithilfe von (9):

$$a_{m+2}/a_m = - (w - 1 - 2m)/[(m+1)(m+2)] \approx 2m/m^2 = 2/m \text{ für große } m\text{-Werte.}$$

Das gleiche Ergebnis erhalten wir für die Reihe (10):

$$1/(m/2 + 1)! \cdot (m/2)!/1 = (m/2)!/[(m/2+1)(m/2)!] = 1/(m/2 + 1) \approx 1/m/2 = 2/m$$

Wir wissen daher, dass die Terme mit hohen  $z$ -Potenzen in der Reihe für  $\exp(z^2)$  sich von den entsprechenden Termen der *geraden* Reihe von  $H(z)$  nur durch eine multiplikative Konstante  $C$  unterscheiden können. Sie können sich von den Termen der *ungeraden* Reihe von  $H(z)$  durch  $zC'$  unterscheiden, worin  $C'$  eine neue Konstante ist. Für  $|z| \rightarrow \infty$  haben die Terme mit niedrigen  $z$ -Potenzen keine Bedeutung für die Bestimmung des Wertes einer der Reihen.

Wir erhalten schließlich

$$H(z) = a_0 C \exp(z^2) + a_1 C' z \exp(z^2), \quad |z| \rightarrow \infty \quad (11)$$

Das bedeutet, dass die Wellenfunktion (5) unendlich wird für  $|z| \rightarrow \infty$ . Dieses Verhalten ist für eine Eigenfunktion nicht annehmbar. Eine Lösung dieses Problems besteht darin, die Reihen zu beschneiden, d.h. dafür zu sorgen, dass die Koeffizienten  $a_m$  von einem gewissen Index  $m_{\max}$  an null werden.

Wenn der Zähler von (9) für einen gewissen Wert  $n := m_{\max}$  null wird, d.h. wenn  $w = 2n + 1$ , sind alle Koeffizienten  $a_{n+2}, a_{n+4}, \dots$  null. Wenn dies für  $n = \text{gerade}$  geschehen sollte, wählen wir  $a_1 = 0$ , um in (7) alle ungeraden Potenzen von  $z$  zu eliminieren. Nehmen wir zum Beispiel an, dass der Wert von  $w$  so ist, dass  $w - 1 - 2m = 0$  für  $n = 6$ . Dann wählen wir  $a_1 = 0$ , und die Reihe (7) verwandelt sich in ein gerades Polynom vom Grad 6

$$H_6(z) = a_0 + a_2 z^2 + a_4 z^4 + a_6 z^6 \quad (12)$$

Die Koeffizienten  $a_2$ ,  $a_4$  und  $a_6$  bestimmen wir mithilfe von (9) in Abhängigkeit von  $a_0$ . Weiter unten zeigen wir dies anhand von Beispielen.

Wenn der Wert von  $w$  so ist, dass  $w - 1 - 2m = 0$  für  $n = \text{ungerade}$ , z.B.  $m_{\max} = n = 7$ , dann wählen wir  $a_0 = 0$ , und  $H(z)$  verwandelt sich in ein Polynom vom Grad 7 mit ungeraden Potenzen:

$$H_7(z) = a_1z + a_3z^3 + a_5z^5 + a_7z^7 \quad (13)$$

(12) und (13) werden *Hermiteische Polynome* vom Grad  $n = m_{\max}$  genannt.

Wir sehen also, dass wir akzeptable Eigenfunktionen für solche  $w$ -Werte erhalten können, die die folgende Beziehung erfüllen

$$w = 2n + 1 \quad (14)$$

$n$  = höchste Potenz im Polynom  $H_n(z)$ .

Außerdem hat man Folgendes zu berücksichtigen

$$a_0 = 0, \text{ wenn } n = 1, 3, 5, \dots$$

$$a_1 = 0, \text{ wenn } n = 0, 2, 4, \dots$$

Diese Wahl von  $w$  sorgt dafür, dass die  $H(z)$ -Reihe mit dem  $n$ -ten Term endet. Die zu  $H_n(z)$  gehörenden Eigenfunktionen lauten (vgl. Gl. 5):

$$\psi_n(z) = A_n \cdot e^{-z^2/2} \cdot H_n(z) \quad (15)$$

Wenn wir die Definition  $w := E/E_0 = 2E/\hbar\omega$  berücksichtigen, sehen wir, dass die Einschränkung der  $w$ -Werte äquivalent ist mit einer Einschränkung der Werte der Gesamtenergie, d.h.

$$E_n = (n + 1/2) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (16)$$

Das sind die möglichen Energieniveaus (Eigenwerte) eines Teilchens in einem Oszillatorpotential.

$$f = (2\pi)^{-1} (k/m)^{1/2} = \text{klassische Schwingungsfrequenz}$$

Das durch (16) gegebene Energiespektrum ist diskret und somit verschieden vom kontinuierlichen Energiespektrum, das die klassische Mechanik erlaubt.

**Beispiele:**

Wir wollen die ersten Hermiteischen-Polynome berechnen.

1.  $H_0(z)$ 

$n = 0$ ,  $w = 2n + 1 = 1$ ,  $n = \text{gerade} \rightarrow a_1 = 0$  und  $a_0 = \text{beliebig}$ .

Gemäß Gl. (9) erhalten wir

$$a_2 = - (1-1-2\cdot 0)/(0+1)(0+2) \cdot a_0 = 0 \cdot a_0 = 0 \rightarrow a_4 = a_6 = \dots = 0$$

Mit  $a_1 = 0$  folgt aus (9)  $a_3 = 0$  und  $a_5 = a_7 = \dots = 0$

Also,  $H_0(z) = a_0$ , wobei der Wert von  $a_0$  beliebig ist, z.B.  $a_0 = 1$ .

Die Werte von  $a_0$  und  $a_1$  können wir durch Normierung der Eigenfunktionen (15) festlegen.

2.  $H_1(z)$ 

$n = 1$ ,  $w = 2 \cdot 1 + 1 = 3$ ,  $n = \text{ungerade} \rightarrow a_0 = 0$  und  $a_1 = \text{beliebig}$ .

$$a_3 = - (3-1-2\cdot 1)/(1+1)(1+2) \cdot a_1 = 0 \cdot a_1 = 0 \text{ und } a_5 = a_7 = \dots = 0$$

Da  $a_0 = 0$ , erhalten wir nach (9)  $a_2 = 0$  und  $a_4 = a_6 = \dots = 0$

Also,  $H_1(z) = a_1 \cdot z$ , z.B.  $a_1 = 2$

3.  $H_2(z)$ 

$n = 2$ ,  $w = 5$ ,  $n = \text{gerade} \rightarrow a_1 = 0$  und  $a_0 = \text{beliebig}$

$$a_2 = - (5-1-2\cdot 0)/(0+1)(0+2) \cdot a_0 = -2 \cdot a_0$$

$$H_2(z) = a_0 + 0 \cdot z - 2 \cdot a_0 \cdot z^2 = a_0(1 - 2 \cdot z^2) = 4z^2 - 2 \text{ für } a_0 = -2$$

4.  $H_3(z)$ 

$n = 3$ ,  $w = 7$ ,  $n = \text{ungerade} \rightarrow a_0 = 0$  und  $a_1 = \text{beliebig}$

$$a_3 = - (7-1-2\cdot 1)/2 \cdot 3 \cdot a_1 = - 2/3 \cdot a_1; a_2 = 0$$

$$H_3(z) = 0 + a_1 \cdot z + 0 \cdot z^2 - 2/3 \cdot a_1 \cdot z^3 = a_1(z - 2/3 \cdot z^3) = 8z^3 - 12z \text{ für } a_1 = -12$$

Wir können alle *Hermite-Polynome* mithilfe der folgenden Rekursionsformel berechnen (vgl. Gl. (23) aus Teil 4.2 und den folgenden Artikel 4.5)

$$H(n,z) = 2z H(n-1,z) - 2(n-1) H(n-2,z) \quad (17)$$

$$\text{mit } H(0,z) = 1 \text{ und } H(1,z) = 2z$$

Zum Beispiel:

$$H(2,z) = 2z \cdot 2z - 2(2-1) \cdot 1 = 4z^2 - 2$$

$$H(3,z) = 2z \cdot (4z^2 - 2) - 2 \cdot 2 \cdot 2z = 8z^3 - 12z \text{ usw.}$$

Mit diesen Funktionen und mit den Normierungsfaktoren  $A_n = (2^n \cdot n! \cdot \pi^{1/2})^{-1/2}$  erhalten wir für die Eigenfunktionen des einfachen harmonischen Oszillators

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(z)|^2 dz = 1,$$

worin  $\psi_n(z) = A_n \cdot H_n(z) \cdot \exp(-z^2/2)$ , vgl. Gl. (15).

**Zum Beispiel:**

$$\int |\psi_3(z)|^2 dz = A_3^2 \cdot \int (8z^3 - 12z)^2 \cdot \exp(-z^2) \cdot dz = 1,$$

mit  $\psi_3(z) = A_3 \cdot (8z^3 - 12z) \cdot \exp(-z^2/2)$ .

Mit der Substitution  $z = x/x_0$  können wir die Eigenfunktionen in Abhängigkeit von  $x$  schreiben

$$\psi_n(x) = x_0^{-1/2} \cdot A_n \cdot \exp(-z^2/2) \cdot H_n(z) \rightarrow \int |\psi_n(x)|^2 \cdot dx = 1$$

Die auszuwertenden Integrale sind von der Form  $\int_0, \infty x^n e^{-ax} dx = \Gamma(n+1)/a^{n+1}$  für  $a > 0$  und  $n > -1$ . Die Gammafunktion wurde in Artikel 7.3.2 des Mechanikkurses eingeführt.

#### 4.4.1 Eigenschaften der Hermite-Poynome

Einige Autoren definieren die *Hermite-Poynome* (HP) in etwas anderer Weise: sie benutzen die Formel von *Rodrigues*, die ein sehr nützliches Werkzeug für das Studium der Eigenschaften der HP ist:

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} \quad (\text{Formel von Rodrigues}) \quad (1)$$

Gl. (1) kann benutzt werden, um das Normierungsintegral zu berechnen.

Eine weitere Definition der HP ist die Reihe

$$H_n(z) = (2z)^n - n(n-1)(2z)^{n-2}/1! + n(n-1)(n-2)(n-3)(2z)^{n-4}/2! + \dots \quad (2)$$

Wenn man (2) Term für Term ableitet, ergibt sich

$$dH_n(z)/dz = 2n\{(2z)^{n-1} - (n-1)(n-2)(2z)^{n-3}/1! = \dots\} = 2n H_{n-1}(z) \quad (n \geq 1) \quad (3)$$

Eine weitere Ableitung ergibt

$$d^2H_n(z)/dz^2 = 2n dH_{n-1}(z)/dz = 2n[2(n-1)] H_{n-2}(z) = 4n(n-1) H_{n-2}(z) \quad (4)$$

Substitution von (2),(3),(4) in die *Hermitesche* Differentialgleichung (Gl. 6 aus 4.4)

$$d^2u/dz^2 - 2zdu/dz + 2nu = 0$$

ergibt  $4n(n-1)H_{n-2}(z) - 2z \cdot 2nH_{n-1}(z) + 2n H_n(z) = 0$  oder

$$H_n(z) = 2z H_{n-1}(z) - 2(n-1) H_{n-2}(z) \quad (5)$$

Diese Rekursionsformel haben wir schon öfter benutzt.

Wir werden jetzt zeigen, dass die Funktionen  $H_n(z) \exp(-z^2/2)$  über  $(-\infty, +\infty)$  eine orthogonale Menge bilden (anders gesagt: die HP sind im Intervall  $(-\infty, +\infty)$  in Bezug auf  $\exp(-z^2/2)$  orthogonal). Das soll heißen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2/2} H_n(z) H_m(z) dz = 2^n n! \sqrt{\pi} \cdot \delta_{mn} \quad (6)$$

Dieser Ausdruck wurde in 4.2 als Gl. (24) geführt.



**Beweis:**

1. Mit Gl. (1) erhalten wir für  $m \neq n$

$$(-1)^n \int H_m H_n \exp(-z^2) dz = (-1)^{2n} \int H_m d^n \exp(-z^2)/dz^n dz = \int H_m d^n \exp(-z^2)/dz^n dz, \text{ da } (-1)^{2n} = 1.$$

Partielle Integration liefert

$$(-1)^n \int H_m H_n \exp(-z^2) dz = \int H_m d^n \exp(-z^2)/dz^n dz = H_m d^{n-1} \exp(-z^2)/dz^{n-1} \Big|_{-\infty, +\infty} - \int dz \cdot dH_m/dz \cdot d^{n-1} \exp(-z^2)/dz^{n-1} \quad (7)$$

Der Ausdruck  $d^{n-1} \exp(-z^2)/dz^{n-1} \Big|_{-\infty, +\infty}$  ist null, da  $\exp(-z^2)$  und alle ihre Ableitungen für  $z = \pm \infty$  verschwinden, denn  $d^{n-1} \exp(-z^2)/dz^{n-1} = -H_{n-1}(z) \exp(-z^2)$ .

(Im zweiten Integral setzen wir  $u := H_m$  und  $dv := d^n \exp(-z^2)/dz^n dz$ , im letzten Integral nehmen wir  $du = dH_m = dz dH_m/dz$  und  $v := d^{n-1} \exp(-z^2)/dz^{n-1}$ )

Wenn wir  $dH_m/dz$  in Gl. (7) durch  $2mH_{m-1}$  ersetzen (unter Verwendung von Gl. (1) oder (3)), ergibt sich

$$(-1)^{2n} \int H_m H_n \exp(-z^2) dz = (-1)^{n+1} \int 2m H_{m-1} \cdot d^{n-1} \exp(-z^2)/dz^{n-1} \cdot dz, \text{ d.h.} \\ \int H_m H_n \exp(-z^2) dz = (-1)^{n+1} 2m \int H_{m-1} \cdot d^{n-1} \exp(-z^2)/dz^{n-1} \cdot dz.$$

Wir wiederholen die partielle Integration und erhalten schließlich

$$\int H_m H_n \exp(-z^2) dz = (-1)^{n+m} 2^m m! \int H_0(z) \cdot d^{n-m} \exp(-z^2)/dz^{n-m} \cdot dz \\ = (-1)^{n+m} 2^m m! [d^{n-m-1} \exp(-z^2)/dz^{n-m-1}]_{-\infty, +\infty} = 0 \quad (8)$$

Jetzt der Fall  $m = n$ :

$$\int [H_n(z)]^2 \exp(-z^2) \cdot dz = \int H_n(z) (-1)^n d^n \exp(-z^2)/dz^n \cdot dz \\ = (-1)^n H_n(z) d^{n-1} \exp(-z^2)/dz^{n-1} \Big|_{-\infty, +\infty} + (-1)^{n-1} \int dH_n(z)/dz \cdot d^{n-1} \exp(-z^2)/dz^{n-1} \cdot dz$$

Der Term  $(-1)^n H_n(z) d^{n-1} \exp(-z^2)/dz^{n-1} \Big|_{-\infty, +\infty}$  ist null.

Wir können erneut  $dH_n/dz$  durch  $2nH_{n-1}$  ersetzen und die partielle Integration  $(n-1)$ -mal wiederholen, um Folgendes zu erhalten

$$\int_{-\infty, +\infty} [H_n(z)]^2 \exp(-z^2) \cdot dz = 2^n n! \int_{-\infty, +\infty} \exp(-z^2) dz = 2^n n! \sqrt{\pi} \quad (9)$$

Damit haben wir bewiesen, dass die Funktionen  $\{\psi_n\} = \{ (2^n n! \sqrt{\pi})^{-1/2} H_n(z) \exp(-z^2/2) \}$  eine normierte und orthogonale Menge bilden.

Mit Hilfe von Gl. (5), die wir folgendermaßen schreiben können (wenn wir  $n$  durch  $n+1$  ersetzen)

$$z H_n = n H_{n-1} + 1/2 \cdot H_{n+1} , \quad (10)$$

können wir beweisen, dass der Erwartungswert  $\langle z \rangle$  von  $z$  gleich null ist

$$\int_{-\infty, +\infty} H_n(z) z H_n(z) \exp(-z^2) dz = 0, \quad (11)$$

denn  $\int_{-\infty, +\infty} \exp(-z^2) H_n(z) [n H_{n-1}(z) + 1/2 H_{n+1}(z)] dz =$

$$= n \int \exp(-z^2) H_n(z) H_{n-1}(z) dz + 1/2 \cdot \int \exp(-z^2) H_n(z) H_{n+1}(z) dz = 0,$$

da beide Integrale null sind, vgl. Gl. (8).

Indem wir Gl. (10) mit  $z$  multiplizieren, können wir schließen, dass

$$z^2 H_n = n z H_{n-1} + 1/2 z H_{n+1} = n[(n-1) H_{n-2} + 1/2 H_n] + 1/2 [(n+1) H_n + 1/2 H_{n+2}]$$

und dass der Erwartungswert von  $z^2$  gleich ist (mit  $\alpha = x_0^{-2}$ )

$$\langle z^2 \rangle = \alpha^{-3/2} (\alpha/\pi)^{1/2} / 2^n n! \cdot \int_{-\infty, +\infty} H_n(z) z^2 H_n(z) \exp(-z^2) dz$$

Da nur die  $H_n$ -Terme einen Beitrag leisten, wird aus dem Integral

$$\langle z^2 \rangle = \alpha^{-3/2} (\alpha/\pi)^{1/2} / 2^n n! \cdot (n+1/2) \int_{-\infty, +\infty} [H_n(z)]^2 \exp(-z^2) dz = (n+1/2)/\alpha, \text{ d.h.}$$

$$\langle z^2 \rangle = (n + 1/2) \cdot \hbar/m\omega = (n + 1/2) \cdot \hbar\omega/m\omega^2 \quad (12)$$

Dies können wir schreiben als  $\langle z^2 \rangle = E/k$  oder  $E = k\langle z^2 \rangle$  mit  $k = m\omega^2$ . Klassisch haben wir  $E = k/2 \cdot A^2$ , Gl. (18) in 4.2.2, sodass sich die Energiebeziehung durch ähnliche Formeln ausdrücken lässt. Vgl. auch das letzte Beispiel in 4.3. (Die Umkehrpunkte eines klassischen Oszillators sind durch  $U(x)=E$  gegeben, d.h. sie liegen in  $x = \pm A = \pm \sqrt{2E/K}$ . Ein Quantenoszillator kann die Grenzen  $\pm A$  überschreiten, wie wir in Fig. 4 von 4.2 sahen. Die Wahrscheinlichkeit für diesen Vorgang werden wir unten in 4.4.3 berechnen.)

#### 4.4.2 Der HO und die Übergangswahrscheinlichkeit

Betrachte die Schwingungen eines geladenen harmonischen Quantenoszillators (z.B. eines Elektrons). Da ein derartiges System ein elektrisches *Dipolmoment* hat, wird es Strahlung (ein Photon) aussenden. (Der einfachste Strahlungstyp ist die elektrische Dipolstrahlung, die klassisch bei der harmonischen Schwingung einer Ladung auftritt. Wenn ein klassischer geladener Oszillator mit der Frequenz  $\omega$  schwingt, so emittiert oder absorbiert er Strahlung derselben Frequenz  $\omega$ . Hier sind wir dabei, das quantische Analogon der klassischen Dipolstrahlung zu studieren.)

Schon in 4.3 sprachen wir von der Emission und der Absorption bei Molekülen und sahen, dass nur solche Zustandsänderungen erlaubt sind, bei denen sich die Quantenzahl um  $\Delta n = \pm 1$  ändert. Diese *Auswahlregel* können wir jetzt analytisch für den HO beweisen, dessen Eigenfunktionen wir vorhin bestimmt haben.

Das elektrische *Dipolmoment* wird definiert durch

$$e \langle x \rangle = e \int_{-\infty, +\infty} x |\psi(x,t)|^2 dx \quad (13)$$

(In einem stationären Zustand haben wir  $|\psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2$ , d.h. es kann keine Strahlung auftreten.)

Ein strahlendes System entspricht einer Situation, in der  $\psi(x,t)$  durch eine Überlagerung von stationären Zuständen gegeben ist. Wir wählen die Quantenzahlen  $n$  und  $n'$ , um eine Überlagerung zu konstruieren:

$$\Psi(x,t) = c\psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar} + c'\psi_{n'}(x)e^{-iE_{n'} t/\hbar} \quad (14)$$

Diese Wellenfunktion ist eine "Mischung" aus Wellenfunktionen, die zu zwei Quantenzuständen mit den Energieniveaus  $E_n$  und  $E_{n'}$  gehören. Wir wollen annehmen, dass  $E_n > E_{n'}$ . Gl. (14) ist die Beschreibung eines *transitorischen* Zustandes, denn die Wellenfunktion (14) beschreibt simultane Wahrscheinlichkeiten dafür, dass das System in Zuständen mit verschiedenen Energien angetroffen wird, d.h. (14) beschreibt ein Quantensystem beim Übergang vom Zustand  $n$  in den Zustand  $n'$ . Bildlich gesprochen hat das System einen Fuß im Zustand  $n$  und den anderen in  $n'$ .

Vor der Transition ist der Koeffizient  $c$  gleich eins, und  $c'$  ist null. Während der Transition verändern sich diese Koeffizienten mit der Zeit, behalten aber die Summe aus  $|c|^2$  und  $|c'|^2$  gleich 1. *Nach* der Transition haben wir  $c = 0$  und  $c' = 1$ , und das System befindet sich wieder in einem stationären Zustand, von dem aus keine Dipolstrahlung möglich ist.

Während des Übergangs besteht die Wahrscheinlichkeitsdichte in Gl.(13) aus zeitabhängigen Teilen und aus solchen, die zeitunabhängig sind, denn wenn wir  $|\psi(x,t)|^2$  berechnen, erhalten wir

$$e \langle x \rangle = c^*c' \int x |\psi_n|^2 dx + c'^*c \int x |\psi_{n'}|^2 dx \quad (a) \quad (15)$$

$$+ c^*c' \int x \psi_n^* \psi_{n'} dx \exp(i(E_n - E_{n'})t/\hbar) \quad (b)$$

$$+ c'^*c \int x \psi_{n'} \psi_n^* dx \exp(-i(E_n - E_{n'})t/\hbar) \quad (c)$$

$$= c^*c' D_0 e^{i\omega t} + (c'^*c D_0 e^{i\omega t})^* \quad (d)$$

(Wir erhalten (15) mithilfe der folgenden Regel für komplexe Zahlen:

$$|a + b|^2 = (a + b)(a + b)^* = (a + b)(a^* + b^*) = aa^* + bb^* + ba^* + ab^*$$

Der Term (c) ist die konjugiert Komplexe von (b).

Wir führen  $\omega = (E_n - E_{n'})/\hbar$  ein und die Größe

$$D_0 = \int_{-\infty, +\infty} \psi_n^* \psi_{n'} dx \quad (16)$$

Da die Summe aus einer komplexen Zahl und ihrer konjugiert Komplexen das Zweifache ihres Realteils ergibt, können wir für das elektrische Dipolmoment schreiben

$$e \langle x \rangle = 2 \operatorname{Re}[(c^*c') \cdot D_0 \cdot e^{i\omega t}] \quad (17)$$

Diese Gleichung ist das Quantenanalogon des strahlenden Dipols der klassischen Elektrodynamik. Der erste Faktor,  $c^*c'$ , variiert nur langsam mit der Zeit und ist nur während des Übergangs von null verschieden, wenn beide Faktoren  $c^*$  und  $c'$  von null verschieden sind. Der Faktor  $D_0$  bestimmt die Intensität der Strahlung und wird "Overlap Integral" genannt. Der Realteil des letzten Faktors, d.h.  $\cos(\omega t)$ , schwingt mit der Frequenz  $\omega = (E_n - E_{n'})/\hbar$ , welches die Frequenz des emittierten Photons ist.

Der folgende Auszug aus einem Brief, den E. Rutherford 1913 an Niels Bohr schickte, weist auf die Schwierigkeit hin, die man hat, wenn man einen Quantenprozess mithilfe von Termen und Bildern der klassischen Physik beschreiben will:

*There appears to me one grave difficulty in your hypothesis, which I have no doubt you fully realise, namely, how does an electron decide what frequency it is going to vibrate at when it passes from one stationary state to the other? It seems to me that you would have to assume that the electron knows beforehand where it is going to stop.*

Die Berechnung der Integrale im Ausdruck für  $\langle x \rangle$  ist normalerweise sehr umständlich, aber für den einfachen harmonischen Oszillator haben wir ja schon alles berechnet, und es ist nur nötig, die Ergebnisse des vorigen Paragraphen zu benutzen.

Wir erinnern uns, dass die Eigenfunktionen dieses Modells in Funktion der *Hermiteischen Polynome* als  $H_n(z) \exp(-z^2/2)$  geschrieben werden. Das Integral  $\int_{-\infty, \infty} \psi_{n'}(x) x \psi_n(x) dx$  ist proportional zu  $\int_{-\infty, +\infty} H_{n'}(z) z H_n(z) \exp(-z^2) dz$ . Unter Verwendung der Rekursionsformel (5) können wir schreiben

$$H_{n+1}(z) - 2zH_n(z) + 2nH_{n-1}(z) = 0 \quad (18)$$

Einsetzung von  $zH_n(z)$ , liefert, mit  $z = (mK/\hbar^2)^{1/4} \cdot x$ , die Integrale

$$\int \psi_{n'}(x) \psi_{n+1}(x) dx + 2n \int \psi_n(x) \psi_{n-1}(x) dx$$

(die Funktionen  $\psi_n$  sind reell, daher fehlen die \*).

Die Integrale sind null für  $n' \neq n+1$  und  $n' \neq n-1$ , da die Eigenfunktionen orthogonal sind. Daraus folgt, dass Dipolübergänge nur möglich sind, wenn

$$n' = n \pm 1 \quad (19)$$

gilt,  $n + 1$  bei Absorption,  $n - 1$  bei Emission. (19) = *Auswahlregel*.

Es können also nur Transitionen zwischen benachbarten Niveaus stattfinden. Da die Energieniveaus beim HO alle den Abstand  $\hbar\omega$  haben, ist die Energie der beteiligten Photonen immer  $E = \hbar\omega$ . Es ist natürlich klar, dass es keine Emissionen vom Grundzustand aus geben kann, denn es gibt keinen Zustand mit geringerer Energie, mit dem der Grundzustand sich vereinigen könnte, um eine Wellenfunktion der Form (13) zu erzeugen.

### 4.4.3 Der Grundzustand des HO

Über den Grundzustand des einfachen harmonischen Oszillators kann man Vieles sagen. Schon in 4.2.1 haben wir den Erwartungswert der potenziellen Energie berechnet:  $\langle U_0 \rangle = \hbar\omega/4$ . Die Berechnung wurde im Einzelnen nicht durchgeführt, daher wollen wir uns jetzt einige Minuten damit beschäftigen.

Beginnen wir mit der Eigenfunktion des Grundzustandes des HO

$$\psi_0(z,t) = \psi_0(z) \exp(-iE_0t/\hbar) = \pi^{-1/4} \exp(-z^2/2) \cdot \exp(-iE_0t/\hbar) \quad (21)$$

Der Operator der potenziellen Energie ist, vgl. 4.2.1, Gl. (12),  $U_{op} = \hbar\omega/2 \cdot z^2$ . Also erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle U \rangle &= \int_{-\infty, +\infty} \psi_0^* \cdot \hbar\omega/2 z^2 \cdot \psi_0 dz \\ &= \hbar\omega/(2\sqrt{\pi}) \int_{-\infty, +\infty} \exp(-z^2/2) z^2 \exp(-z^2/2) dz \\ &= \hbar\omega/(2\sqrt{\pi}) \int_{0, +\infty} \exp(-z^2) z^2 dz = \hbar\omega/(2\sqrt{\pi}) \cdot 2 \cdot \sqrt{\pi}/4, \text{ ou seja} \\ \langle U \rangle &= \langle E_p \rangle = \hbar\omega/4 = E_0/2 \quad (22) \end{aligned}$$

Wir benutzen die Formel

$$\int_{-\infty, +\infty} z^2 \exp(-a^2 z^2) dz = 2 \int_{0, +\infty} z^2 \exp(-a^2 z^2) dz = 1/(2a^3) \cdot \sqrt{\pi}, \quad a > 0 \quad (23)$$

Das ist erlaubt, da der Integrand eine gerade Funktion ist.

Nun benötigen wir noch die folgende Formel

$$\int_{-\infty, +\infty} \exp(-a^2 z^2) dz = 2 \int_{0, +\infty} \exp(-a^2 z^2) dz = 1/(2a) \cdot \sqrt{\pi}, \quad a > 0 \quad (24)$$

(Um das Integral  $J = \int_{0, +\infty} \exp(-x^2) dx$  auszuwerten, können wir es zuerst in ein Flächenintegral umwandeln (der Wert eines Integrals hängt nicht vom Namen der Variablen ab)

$$J^2 = \int_{0, +\infty} \exp(-x^2) dx \cdot \int_{0, +\infty} \exp(-y^2) dy = \iint_{1. \text{ Quadrant}} \exp(-(x^2+y^2)) \cdot dx dy.$$

Jetzt benutzen wir Polarkoordinaten

$$J^2 = \int_{0, \pi/2} d\theta \int_{0, +\infty} r dr \exp(-r^2) = \pi/2 \cdot (\exp(-r^2)/(-2))|_{0, +\infty} = \pi/4$$

Das Ergebnis ist:  $J = 1/2 \cdot \sqrt{\pi} \quad (25)$ .

Um den Erwartungswert der *kinetischen* Energie zu berechnen, können wir die Formel (16) aus Teil 4.2 benutzen, um dann  $\langle E_k \rangle = \hbar\omega/4$  zu erhalten. Aber es ist sicher instruktiv, den Operator von  $E_k = p^2/2m$  zu bestimmen, indem man den Operator von  $p$  benutzt:  $p_{op} = -i\hbar\partial/\partial x$ , vgl. Teil 3.1.

Der Operator von  $E_k$  ergibt sich zu  $E_{k,op} = 1/2m \cdot (-i\hbar\partial/\partial x)^2$ , wobei das Quadrat des Operators  $p_{op}$  die Anwendung von  $p_{op}(p_{op})$  auf eine gegebene Funktion  $f(x)$  bedeutet, d.h.

$p_{op}(p_{op} f(x)) = p_{op} (-i\hbar\partial f/\partial x) = -i\hbar\partial/\partial x (-i\hbar\partial f/\partial x) = -\hbar^2 \partial^2 f(x)/\partial x^2$ . Daher folgt

$$E_{k,op} = -1/2m \cdot \hbar^2 \cdot \partial^2/\partial x^2 \quad (26)$$

Vgl. zu  $p_{op}^2$  auch 3.3, Beispiel 2.

(Wir werden später darüber sprechen, welche Bedeutung es hat, dass ein Operator *hermitesch* ist, denn alle Operatoren der Quantenmechanik müssen *hermitesch* sein. Der Operator der kinetischen Energie ist das Produkt aus einer reellen Konstanten und dem Operator  $p_{op}^2$ . Da  $p_{op}$  hermitesch ist, ist auch jede Potenz von  $p_{op}$  hermitesch. Da das Produkt einer reellen Konstanten mit einem hermiteschen Operator wieder einen solchen Operator liefert, können wir schließen, dass auch  $E_{k,op}$  ein hermitescher Operator ist.)

Der Erwartungswert von  $E_k$  ist also

$$\langle E_k \rangle = -\hbar^2/2m x_0^2 \int_{-\infty, +\infty} \psi_0^* \partial^2 \psi_0 / \partial z^2 dz$$

mit  $\partial/\partial x = 1/x_0 \cdot \partial/\partial(x/x_0) = 1/x_0 \cdot \partial/\partial z$ .

Die Ableitung ist  $\partial^2 \psi_0 / \partial z^2 = \pi^{-1/4} (z^2 \exp(-z^2/2) - \exp(-z^2/2)) \exp(-iE_0 t/\hbar)$ .

Die konjugiert Komplexe von  $\psi_0$  ist  $\psi_0^* = \pi^{-1/4} \exp(-z^2/2) \exp(+iE_0 t/\hbar)$

und  $\langle E_k \rangle = \hbar^2/(x_0^2 m \sqrt{\pi}) [ \int_{0, +\infty} \exp(-z^2) dz - \int_{0, +\infty} z^2 \exp(-z^2) dz ]$

Mit den Werten (23) und (25) für die Integrale ergibt sich schließlich

$$\langle E_k \rangle = \hbar\omega/4 = E_0/2 \quad (27)$$

Zusammenfassend können wir notieren

$$\langle E \rangle = \langle E_k \rangle + \langle E_p \rangle = \hbar\omega/2 = E_0, \quad (28)$$

was wir ja schon in 4.2.1 sahen.

Man kann zeigen, dass die Beziehung (28) für alle Quantenzahlen gilt, d.h.

$$\langle E_k \rangle = \langle E_p \rangle = E_n/2 \quad (29)$$

In 4.2 haben wir in Fig. 3 die *Wahrscheinlichkeitsdichte* für den Grundzustand  $n = 0$  und für die ersten beiden Anregungszustände mit  $n = 1$  und  $n = 2$  gezeichnet.

Die klassische Bewegung mit der Energie  $\hbar\omega/2$  ist nur in den Grenzen von  $-A$  bis  $+A$  möglich, d.h. zwischen  $z = -1$  und  $z = +1$ . Wie aber Fig. 1 unten zeigt, haben wir für den Quantenoszillator eine ziemlich große Chance, ihn außerhalb dieser Grenzen anzutreffen.

Die Wahrscheinlichkeit im Intervall  $(-1, +1)$  zu sein, ist gegeben durch das Integral

$$P(-A,A) = \int_{-1,+1} \psi_0^* \psi_0 dz = \pi^{-1/2} \int_{-1,+1} \exp(-z^2) dz = 2 \pi^{-1/2} \int_{0,+1} \exp(-z^2) dz$$

Wegen der Wichtigkeit der Funktion  $\exp(-z^2)$ , wurden ihre Integrale oft tabelliert. Wir können aber  $\int_{0,+1} \exp(-z^2) dz$  numerisch mit der *Trapezregel* berechnen, die wir auch in 4.2 (Programm 2) benutzten.

Programm 1 (Trapezregel)

```

• reset()://Wahrscheinlichkeitsdichte bei HO
  N:=1.0:H:=0.01:
  f:=exp(-z^2):
  z:=N:
  fN:=f://letzter Wert
  z:=0:
  f0:=f://erster Wert
  s:=0:
  for z from 0 to N step H do

  s:= s+f:

  end_for:
  s:=s-(f0+fN)/2:
  integral:=float(2*s*H/sqrt(PI)):// Fläche von -1 bis +1

```

0.8426938745



Programm für  $|\psi_0|^2$  des harmonischen Oszillators (HO):

**Programm 2** (Wahrscheinlichkeitsdichte des Grundzustandes de HO)

- `reset()//Wahrscheinlichkeitsdichte des HO, n = 0`  
`A0:=0.7511:`  
`psi0:=z->A0*exp(-z^2/2):`  
`Psi0 := plot::Function2d(psi0^2(z), z = -2..2, Color =`  
`RGB::Green)//n=0`  
`U1 := plot::Arrow2d([-1,0],[-1,0.2],Color = RGB::Blue):`  
`U2 := plot::Arrow2d([1,0],[1,0.2],Color = RGB::Blue):`  
`plot(Psi0,U1,U2, AxesTitles=["z","|Psi(z)|^2"],`  
`plot::Text2d("n=0",[1,0.4]))`

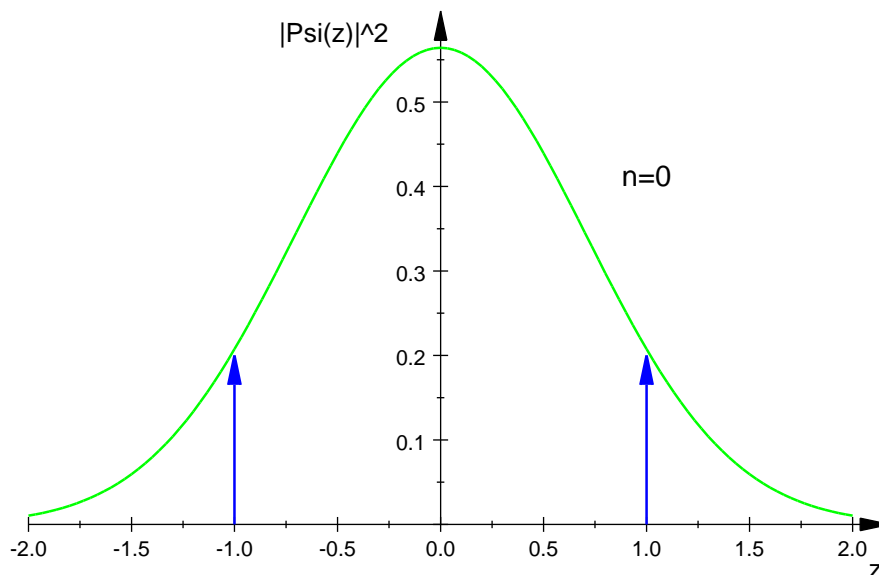


Fig. 1

Die Fläche zwischen  $-1 < z < +1$  (klassische Grenzen) ist gleich 0.8427 FE und wurde mit Programm 1 berechnet.

Man sieht, dass das Teilchen im Grundzustand mit einer Wahrscheinlichkeit von  $P = 1 - 0.8427 = 0.1573 \approx 16\%$  außerhalb der klassischen Grenzen ange-troffen werden kann.

MuPAD berechnet das Integral  $2 \pi^{-1/2} \int_{0,z} \exp(-t^2) dt$  mit `erf(z)`, z.B. ergibt `float(erf(1)) = 0.8427`