

4. Der harmonische Oszillator

- **Motivation**

Kleine Schwingungen (→ lineare Anregungen) um stabile Gleichgewichtslagen, z.B.

- Atom- und Molekülschwingungen

→ Spektroskopie

→ Gitterschwingungen im Kristallgitter/Phononen

→ Wärmekapazität von Festkörpern bei niedrigen Temperaturen $c(T \rightarrow 0) \sim T^3$ (P. Debye)

- Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

→ spektrale Energieverteilung der Hohlraumstrahlung Planck, 1900

KM: Klassisches Teilchen führt harmonische Oszillationen aus (vgl. Skript Mechanik, Kap. 3 (Schwingungen) und Kap. 1.7 (mathematisches Pendel)). Im eindimensionalen Fall ist

$$U(x) = \frac{k}{2} x^2 = \frac{m\omega^2}{2} x^2, \quad \omega := \sqrt{\frac{k}{m}} \rightarrow \text{Kreisfrequenz, Lösung der BWG } x(t) = a \cos(\omega t + \varphi),$$

$$E = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 = \dots = \frac{m\omega^2}{2} a^2 \geq 0 \text{ kontinuierlich.}$$

QM: Wir erwarten diskreten Energieniveaus und Eindringen des qmT in den klassisch verbotenen Ortsbereich mit $E < U(x)$.

Vorgehensweise klar: Löse die stationäre SG mit $U(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2$ und bestimme die

→ **Wellenfunktionen** (WF), die dazugehörigen → **Energieniveaus** und → die **Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten** (AWD).

Da das Potenzial nicht explizit von der Zeit abhängt, ist $\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, die AWD zeitunabhängig und $\psi(x)$ eine normierbare Lösung der Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \psi = E \psi \quad \rightarrow \text{stationäre SG des HO} \quad (4.1)$$

Die gesuchten normierbaren Lösungen sind entweder gerade oder ungerade Funktionen von x , denn $U(x) = U(-x)$.

- **Lösung der stationären SG für den eindimensionalen HO:**

Nach Einführung der dimensionslosen Größen y und α nimmt (4.1) folgende Form an

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + (\alpha - y^2)\psi = 0, \quad y = \frac{x}{b}, \quad b := \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad \alpha := \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (4.2)$$

Die Parameter b (\rightarrow "Oszillatorlänge") und α bestimmen die charakteristische Längen- bzw. Energieskala des HO.

Die lineare Differentialgleichung (4.3) lösen wir mit der \rightarrow **Sommerfeld'schen Polynom-methode**.

Dazu wird zunächst das asymptotische Verhalten der Lösung für $y \rightarrow \pm\infty$ unter Berücksichtigung der Normierungsbedingung bestimmt und dann für den nach Abspaltung der Asymptote verbleibenden „Rest“ ein Reihenansatz verwendet.

$$y \rightarrow \pm\infty: \psi'' - y^2 \psi = 0$$

Der Ansatz $\psi \sim e^{-\frac{y^2}{2}}$ ergibt mit $\psi' \sim -y e^{-\frac{y^2}{2}}$, $\psi'' \sim -e^{-\frac{y^2}{2}} + y^2 e^{-\frac{y^2}{2}} = (y^2 - 1)e^{-\frac{y^2}{2}} \sim y^2 e^{-\frac{y^2}{2}}$

$\psi'' - y^2 \psi = 0$, d.h. die Asymptote der gesuchten Lösung für $|y| \rightarrow \infty$ ist $e^{-\frac{y^2}{2}}$.

Wir trennen diese Asymptote mit der Substitution

$$\psi(y) = \tilde{H}(y) e^{-\frac{y^2}{2}}, \quad \tilde{H}(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k \quad (4.3)$$

ab und versuchen, $\tilde{H}(y)$ über einen Potenzreihenansatz zu bestimmen. Mit

$$\psi' = \tilde{H}' e^{-\frac{y^2}{2}} - y \tilde{H} e^{-\frac{y^2}{2}}, \quad \psi'' = \tilde{H}'' e^{-\frac{y^2}{2}} - 2y \tilde{H}' e^{-\frac{y^2}{2}} - \tilde{H} e^{-\frac{y^2}{2}} + \tilde{H} y^2 e^{-\frac{y^2}{2}} \text{ ergibt sich aus (4.2)}$$

$$\tilde{H}'' - 2y \tilde{H}' + (\alpha - 1) \tilde{H} = 0 \quad (4.4)$$

Für die Koeffizienten a_k erhalten wir aus (4.4) unter Berücksichtigung von

$$\tilde{H}'(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k y^{k-1}$$

$$\tilde{H}''(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k(k-1) y^{k-2} = \sum_{k=2}^{\infty} a_k k(k-1) y^{k-2} = \sum_{k \rightarrow k+2} \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2} (k+2)(k+1) y^k$$

die Relation

$$\sum_{k=0}^{\infty} [a_{k+2} (k+2)(k+1) y^k - 2a_k k y^k + (\alpha - 1) a_k y^k] = \sum_{k=0}^{\infty} [\dots] y^k = 0 \text{ für alle } k.$$

Wegen der linearen Unabhängigkeit der y^k folgt daraus die **Rekursionsformel**

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\alpha}{(k+1)(k+2)} a_k \quad (4.5)$$

für die Koeffizienten in der Potenzreihenentwicklung von $\tilde{H}(y)$ in (4.3). Bei Vorgabe von a_0 und a_1 (den beiden freien Konstanten der ODE 2. Ordnung (4.5)) erhalten wir rekursiv aus (4.5) alle weiteren Entwicklungskoeffizienten a_k und damit $\tilde{H}(y)$ sowie $\psi(y)$.

Für große Werte von k haben wir aus (4.5)

$$a_{k+2} \sim \frac{2}{k} a_k \quad \text{also} \quad a_k \sim \frac{1}{\left(\frac{k}{2}\right)!}, \quad \text{denn dann ist}$$

$$a_{k+2} \sim \frac{1}{\left(\frac{k+2}{2}\right)!} = \frac{1}{\left(\frac{k+2}{2}\right)\left(\frac{k+2}{2}-1\right)!} = \frac{1}{\left(\frac{k+2}{2}\right)\left(\frac{k}{2}\right)!} = \frac{2}{k+2} a_k \sim \frac{2}{k} a_k.$$

Das bedeutet

$$e^{y^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(y^2)^n}{n!} = \sum_{n=\frac{k}{2}}^{\infty} \frac{y^k}{\left(\frac{k}{2}\right)!}, \quad \text{also} \quad \tilde{H}(y) \sim e^{y^2} \quad \text{für} \quad |y| \rightarrow \infty.$$

Damit wäre die WF $\psi(y) = \tilde{H}(y) \sim e^{-\frac{y^2}{2}} \sim e^{\frac{y^2}{2}}$ für $|y| \rightarrow \infty$, also nicht normierbar.

Schlussfolgerung: Die Potenzreihe $\tilde{H}(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k$ mit a_k entsprechend (4.5) muss nach

einer endlichen Anzahl von Termen abbrechen, um die Normierbarkeit der WF zu sichern.

Deshalb fordern wir, dass der Zähler in (4.5) ab einem bestimmten Wert von k , sagen wir ab $k = n$, Null wird

$$\alpha = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{mit} \quad \begin{cases} a_1 = 0, & \text{wenn } n \text{ gerade} \\ a_0 = 0, & \text{wenn } n \text{ ungerade} \end{cases} \quad \text{Abbruchbedingung} \quad (4.6)$$

Mit $\alpha = 2n + 1$ werden alle Koeffizienten a_k für $k \geq n$ Null. Die Bedingungen $a_0 = 0$ und $a_1 = 0$ sichern, dass die WF entweder ungerade bzw. gerade Funktionen von x sind; andere Lösungen würden der für das Potenzial des HO geltenden Bedingung $U(x) = U(-x)$ widersprechen.

- **Energiespektrum**

Für das einer WF $\psi_n(x)$ entsprechende Energieniveau folgt wegen $\alpha := \frac{2E}{\hbar\omega}$ nun

$$\psi_n(x) \leftrightarrow E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \rightarrow \text{\textbf{äquidistante, diskrete Energieniveaus (4.7)}}$$

→ Das Energiespektrum des qm HO ist diskret,
 äquidistant und (im eindimensionalen Fall)
 nicht entartet. Der Abstand zwischen benachbarten
 Energieniveaus beträgt $\Delta E = \hbar\omega$.

- Molekülschwingungen

- **Explizite Berechnung der WF**

$$\psi(y) \rightarrow \psi_n(y) = \sum_{k=0}^{\downarrow n} a_k y^k e^{-\frac{y^2}{2}} \quad \text{mit} \quad a_{k+2} = \frac{2k+1-\alpha}{(k+1)(k+2)} a_k \stackrel{\alpha=2n+1}{=} \frac{2(k-n)}{(k+1)(k+2)} a_k.$$

n = 0: wähle $a_1 = 0$, damit sind alle $a_{2k+1} = 0$, alle ungeraden Potenzen entfallen, WF gerade

$$\rightarrow \psi_0(y) = a_0 e^{-\frac{y^2}{2}} = c_0 e^{-\frac{y^2}{2}}$$

n = 1: wähle $a_0 = 0$, damit alle $a_{2k} = 0$, alle geraden Potenzen entfallen, WF ungerade

Rekursionsformel führt auf $a_3 = 0$, usw.

$$\rightarrow \psi_1(y) = a_1 y e^{-\frac{y^2}{2}} = c_1 2y e^{-\frac{y^2}{2}}$$

n = 2: wähle $a_1 = 0$, damit alle $a_{2k+1} = 0$, WF gerade

$$\text{Rekursionsformel führt auf } a_2 = \frac{2(0-2)}{(0+1)(0+2)} a_0 = -2a_0.$$

$$\rightarrow \psi_2(y) = a_0(1-2y^2) e^{-\frac{y^2}{2}} = c_2(4y^2 - 2) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

n=3: wähle $a_0 = 0$, also alle $a_{2k} = 0$, WF ungerade

$$\text{Rekursionsformel führt auf } a_3 = \frac{2(1-3)}{(1+1)(1+2)} a_1 = -\frac{4}{2 \cdot 3} a_1 = -\frac{2}{3} a_1.$$

$$\rightarrow \psi_3(y) = a_1 \left(y - \frac{2}{3} y^3 \right) e^{-\frac{y^2}{2}} = c_3(8y^3 - 12y) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

Alle WF $\psi_n(y)$ sind proportional zu einer Konstante c_n . Diese vor der Normierung freien Konstanten haben wir mit $c_0 = a_0$, $c_1 = \frac{a_1}{2}$, $c_2 = -2a_0$, $c_3 = -12a_1$ usw. so gewählt, dass die WF in der Form

$$\psi_n(y) = c_n H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \quad \text{mit} \quad H_n(y) := (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} (e^{-y^2}) \quad (4.8)$$

darstellbar sind. Die Funktionen $H_n(y)$ heißen **Hermite'sche Polynome**.

Beweis: Für $f(y) = e^{-y^2}$ ist

$$\rightarrow f'(y) = -2ye^{-y^2} \quad \text{also} \quad H_1(y) = 2y,$$

$$\rightarrow f''(y) = -2e^{-y^2} + 4y^2 e^{-y^2} = (4y^2 - 2)e^{-y^2} \quad \text{also} \quad H_2(y) = 4y^2 - 2,$$

$$\rightarrow f'''(y) = 4ye^{-y^2} + 8y^2 e^{-y^2} - 8y^3 e^{-y^2} = (12y - 8y^3)e^{-y^2} \quad \text{also} \quad H_3(y) = 8y^3 - 12y,$$

\rightarrow usw.

Bemerkung: Gleichung (4.4) gehört zu den ODE der Form $g_2(x)y'' + g_1(x)y' + g_0(x)y = 0$, die sich durch orthogonale Polynome lösen lassen (vgl. Abramowitz/Stegun, Pocket book of mathematical functions (selected material), Kap. 22.6, S. 340):

	$g_2(x)$	$g_1(x)$	$g_0(x)$	$y(x)$
22.6.19	1	-2x	2n	$H_n(x)$
22.6.20	1	0	$2n + 1 - x^2$	$e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x)$

Die Rücktransformation zu dimensionsbehafteten Größen gemäß (4.2) ergibt

$$\psi_n(x) = c_n H_n\left(\frac{x}{\sqrt{b}}\right) e^{-\frac{x^2}{2b}} = c_n H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

Die Konstanten c_n werden aus der Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_n(x)|^2 = 1$$

ermittelt (\rightarrow vgl. Übungsblatt). Insgesamt erhalten wir folgende WF für den eindimensionalen HO

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.9)$$

- **Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten für harmonisch gebundene Quanten**

QM: Aus (4.9) folgt für die Wahrscheinlichkeit $w_n(x)$, ein qmT mit Energie E_n im Intervall $(x, x + dx)$ anzutreffen, der Ausdruck

$$w_n(x) dx = |\psi_n(x)|^2 dx = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2^n n!} \left[H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \right]^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

KM: Die Wahrscheinlichkeit $w_{kl}(x)$, das klassische Teilchen an einem Punkt x aus dem Intervall $(x, x + dx)$ anzutreffen ist proportional zum Zeitintervall dt , in dem das Teilchen die Strecke dx durchläuft. Da jedes dx pro Periodendauer T zweimal durchlaufen wird, folgt für die "AWD des klassischen Teilchens"

$$w_{kl}(x) dx = 2 \frac{dt}{T} = 2 \frac{\frac{dx}{v}}{\frac{2\pi}{\omega}} = \frac{\omega}{\pi} \frac{dx}{v(x)}.$$

Die Abhängigkeit der Geschwindigkeit v vom Ort x ergibt sich mit $x(t) = a \cos(\omega t)$ zu

$$v(t) = -a \omega \sin(\omega t) \quad \text{also} \quad v(x) = \pm a \omega \sqrt{1 - \cos^2(\omega t)} = +a \omega \sqrt{1 - \left(\frac{x}{a}\right)^2} = \omega(a^2 - x^2)^{\frac{1}{2}}.$$

Also ist

$$w_{kl}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\pi(a^2 - x^2)^{\frac{1}{2}}} & \text{für } |x| < a \\ 0 & \text{für } |x| \geq a \end{cases}.$$

Wie erwartet, divergiert w_{kl} an den Umkehrpunkten der klassischen Bewegung. Die

"Normierungsbedingung" $\int_{-\infty}^{\infty} dx w_{kl}^2(x) = 1$ ist aber erfüllt, denn

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx w_{kl}(x) = \int_{-a}^a dx \frac{1}{\pi \sqrt{a^2 - x^2}} \stackrel{a^2 > x^2}{=} \frac{1}{\pi} \arcsin\left(\frac{x}{a}\right) \Big|_{-a}^a = \frac{1}{\pi} [\arcsin(1) - \arcsin(-1)] = \frac{1}{\pi} \left[\frac{\pi}{2} - \left(-\frac{\pi}{2}\right) \right] = 1$$

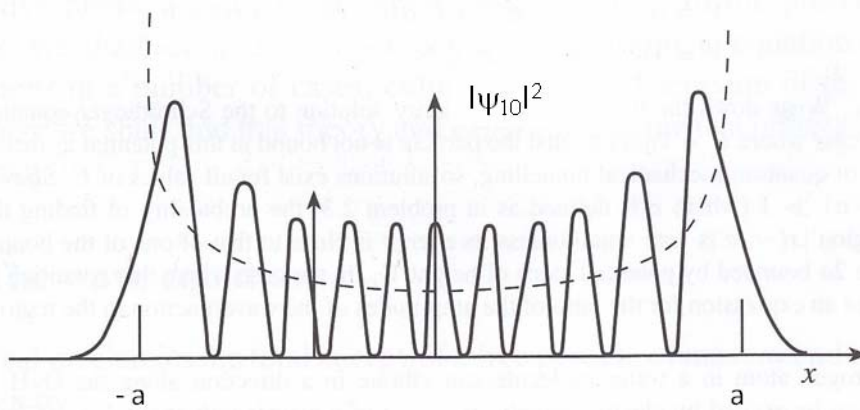
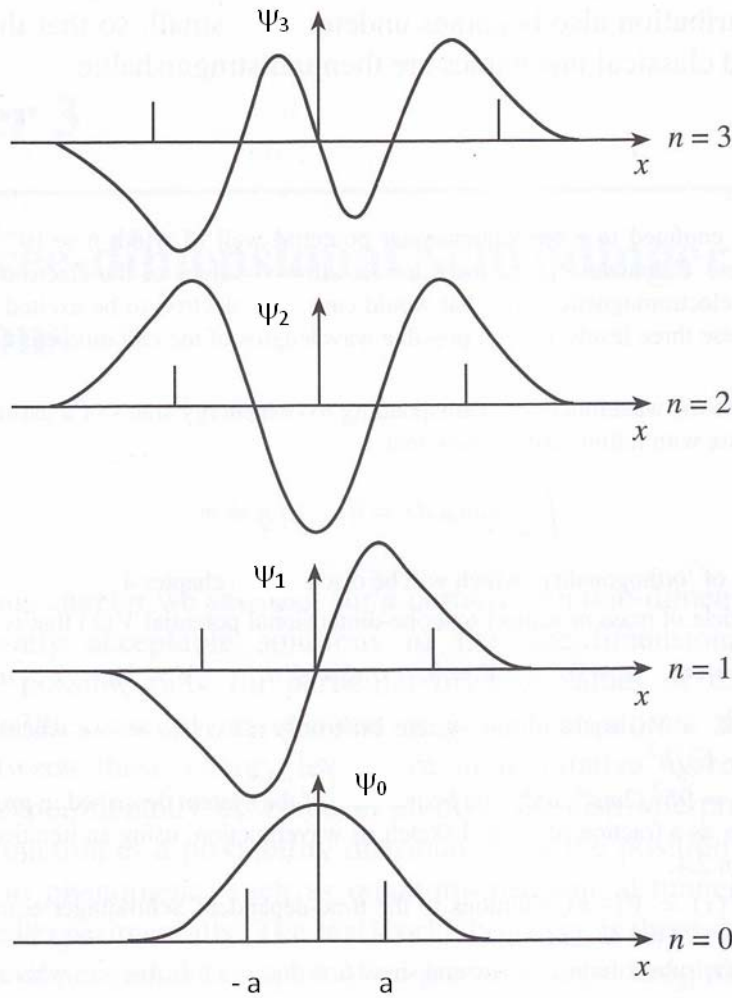
Für die Schwingungsamplitude a gilt wegen $E = \frac{m}{2} v^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 = \frac{m}{2} a^2 \omega^2$ die Relation

$$a = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}.$$

Stellt man klassische und quantenmechanische AWD für hohe Werte der Quantenzahl n (hoch angeregte Zustände) gegenüber, nähern sich beide Kurven immer mehr an (vgl. Skizze)

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\psi_n(x)|^2 = w_{kl}(x).$$

Die Abbildung auf der folgenden Seite fasst die Ergebnisse grafisch zusammen (Quelle: Rae).



Die WF sind entweder gerade oder ungerade, wobei der Knotensatz erfüllt ist. Im klassisch erlaubten Bereich oszilliert die WF, während sie im klassisch verbotenen Bereich exponentiell abklingt. Mit steigender Quantenzahl n beobachtet man zunehmend stärker ausgeprägte lokale Maxima von $w_n(x)$ in der Nähe der Umkehrpunkte der klassischen Bewegung.

Bemerkungen:

(i) Wir werden das Eigenwertproblem für den Hamilton-Operator des HO (die stationäre SG)

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad \text{mit} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$$

später nur unter Verwendung der Vertauschungsrelation $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ lösen und zu den gleichen Ergebnissen gelangen. Diese auf Dirac zurückgehende "algebraische" Lösungsmethode führt uns auf die Begriffe der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren und der "2. Quantisierung" die im Kurs Quantenmechanik II (Vertiefungskurs der Theoretischen Physik im Masterstudiengang) ausgebaut werden.

(ii) Während das klassische Teilchen im Potenzialminimum ruhen kann

$$E = 0, \quad x = 0, \quad p_x = 0, \quad w_{kl}(x) = \delta(x),$$

liegt der Grundzustand des qmT bei

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad \text{mit} \quad w_0(x) = |\psi_0(x)|^2 \sim e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}.$$

Wir werden sehen, dass $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$ eine Konsequenz aus der Unschärferelation (UR) ist, die im vorliegenden Fall die gleichzeitige scharfe Messung von Ort und Impuls einschränkt. E_0 wird sich als kleinster mit der UR zu vereinbarende Wert der Energie des HO erweisen.

(iii) Isotroper dreidimensionaler HO $\rightarrow U(\mathbf{r}) = \frac{m\omega^2}{2}r^2$:

Zu lösen ist die stationäre SG

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad \text{mit} \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m\omega^2}{2}r^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2 + z^2).$$

Da

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z, \quad \hat{H}_i := -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{m\omega^2}{2}x_i^2, \quad i = x, y, z$$

lässt sich die stationäre SG durch den Separationsansatz

$$\Psi(\underline{r}) = \Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \psi_{n_x}(x) \cdot \psi_{n_y}(y) \cdot \psi_{n_z}(z)$$

lösen, wobei die $\psi_{n_i}(x_i)$ die WF des eindimensionalen HO sind (nachprüfen). Die Energieniveaus

$$E_n = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega$$

sind (bis auf den Grundzustand $E_0 = \frac{3}{2} \hbar\omega$) entartet: Dem ersten angeregten Zustand

$E_1 = \frac{5}{2} \hbar\omega$ entsprechen die drei WF ψ_{100} , ψ_{010} und ψ_{001} , dem zweiten angeregten Zustand

die WF ψ_{200} , ψ_{020} , ... ψ_{110} , ... usw. Ursache der Entartung ist die Symmetrie des Potentials.