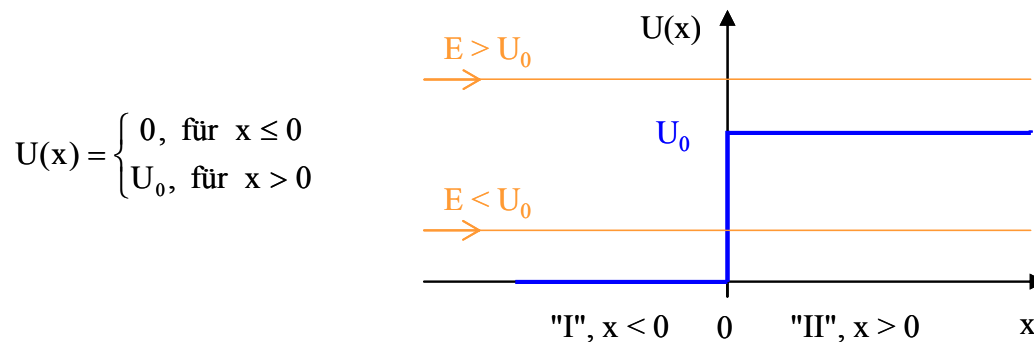


2.4 Eindimensionale Potenzialstufe

Wir untersuchen die Wechselwirkung eines von links einfallenden qmT mit der rechteckigen, unendlich weit ausgedehnten Potenzialstufe



In der **KM** würden wir folgendes Verhalten erwarten:

$E > U_0$: Im Übergangsbereich $x \sim 0$ reduziert sich die kinetische Energie von $E = \frac{p^2}{2m}$

auf $E - U_0 = \frac{p^2}{2m}$. Das klassische Teilchen wird abgebremst, aber nicht an der Potenzialstufe reflektiert.

$E < U_0$: Ein klassisches Teilchen wird vollständig bei $x = 0$ reflektiert, der Bereich $x > 0$ ist klassisch nicht zugänglich.

Für ein **qmT** können wir die WF in den Bereichen "I" ($x < 0$) und "II" ($x > 0$) auf der Basis der Ergebnisse in Kap. 2.2 sofort hinschreiben:

$$\underline{x < 0}: \psi_I(x) = \underbrace{e^{ikx}}_{\text{einfallend}} + \underbrace{\rho e^{-ikx}}_{\text{reflektiert}} \quad \text{mit } \hbar k = \sqrt{2mE}$$

$$\underline{x > 0}: \psi_{II}(x) = \begin{cases} \tau e^{iqx}, & \text{für } E > U_0 \text{ mit } \hbar q = \sqrt{2m(E - U_0)} \text{ reell} \\ \tau e^{\kappa x}, & \text{für } E < U_0 \text{ mit } \hbar \kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)} \text{ reell} \end{cases}$$

An der Stelle $x = 0$ fordern wir die Stetigkeit der WF und ihrer ersten Ableitung (endlicher Sprung des Potentials). Auf diese Weise können wir die zunächst unbekanntenen Konstanten ρ und τ bestimmen.

Der Koeffizient vor e^{ikx} kann wegen der Normierung der gesamten WF ohne Beschränkung der Allgemeinheit gleich Eins gesetzt werden.

Stetigkeit: $\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \rightarrow 1 + \rho = \tau$

Stetigkeit der Ableitung: $\psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \rightarrow ik(1-\rho) = \begin{cases} iq\tau, & E > U_0 \\ \kappa\tau, & E < U_0 \end{cases}$.

Nach Elimination von τ folgt $\rho = \begin{cases} \frac{k-q}{k+q}, & E > U_0 \\ \frac{k-i\kappa}{k+i\kappa}, & E < U_0 \end{cases}$ und $\tau = 1 + \rho = \begin{cases} \frac{2k}{k+q}, & E > U_0 \\ \frac{2k}{k+i\kappa}, & E < U_0 \end{cases}$.

Damit ist die WF (bis auf den hier unwesentlichen Normierungsfaktor) eindeutig bestimmt.

Reflexion und Transmission berechnen wir mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsstromdichte (WSD) entsprechend (1.5)

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \text{div } \underline{j} = 0 \quad \text{mit } w := \psi^* \psi \quad \text{und } \underline{j} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi).$$

Im vorliegenden eindimensionalen und stationären Fall haben wir $\frac{dj}{dx} = 0$, also $\underline{j} = \text{const}$, unabhängig von x in den Bereichen "I" und "II".

Für die WSD der einfallenden "Welle" $\psi_0 = e^{ikx}$ folgt

$$j_0 = \frac{i\hbar}{2m} [e^{ikx} (-ik) e^{-ikx} - e^{-ikx} (ik) e^{ikx}] = \frac{i\hbar}{2m} (-2ik) = \frac{\hbar k}{m}.$$

Analog ergibt sich für die WSDn der reflektierten "Welle" ρe^{-ikx}

$$j_R = \frac{i\hbar}{2m} [\rho e^{-ikx} (ik) \rho^* e^{ikx} - \rho^* e^{ikx} (-ik) \rho e^{-ikx}] = \frac{i\hbar}{2m} (2ik) \rho^* \rho = -\frac{\hbar k}{m} |\rho|^2 = -j_0 |\rho|^2$$

und für die der "transmitierten Welle" $\psi_{II}(x)$

$$j_T = \begin{cases} \frac{\hbar q}{m} |\tau|^2 = \frac{q}{k} j_0 |\tau|^2, & E > U_0 \\ 0, & E < U_0 \end{cases}.$$

Wir definieren

Def.: $R(E) := \frac{j_R}{j_0} \rightarrow$ Reflexionskoeffizient und $T(E) := \frac{j_T}{j_0} \rightarrow$ Transmissionskoeffizient

und erhalten im Fall der hier betrachteten Potenzialstufe für die Fälle $E < U_0$ und $E > U_0$

$$\underline{E < U_0}: \quad R(E) := \frac{j_R}{j_0} = |\rho|^2 = \left| \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \right|^2 = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \frac{k + i\kappa}{k - i\kappa} = 1 \quad \text{und} \quad T(E) := \frac{j_T}{j_0} = 0.$$

In diesem Fall wird das qmT vollständig an der (unendlich breiten!) Potenzialstufe reflektiert.

Trotzdem dringt es aber in die (endlich hohe!) Barriere ein, denn mit der exponentiell abklingenden WF ψ_{II} fällt zwar auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte im Bereich "II" exponentiell fallend ab, ist aber dennoch verschieden von Null. Als Maß für die Eindringtiefe L in die Barriere bietet sich die Größe

$$L \sim \frac{1}{\kappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U_0 - E)}} \rightarrow \underline{\text{Eindringtiefe}}$$

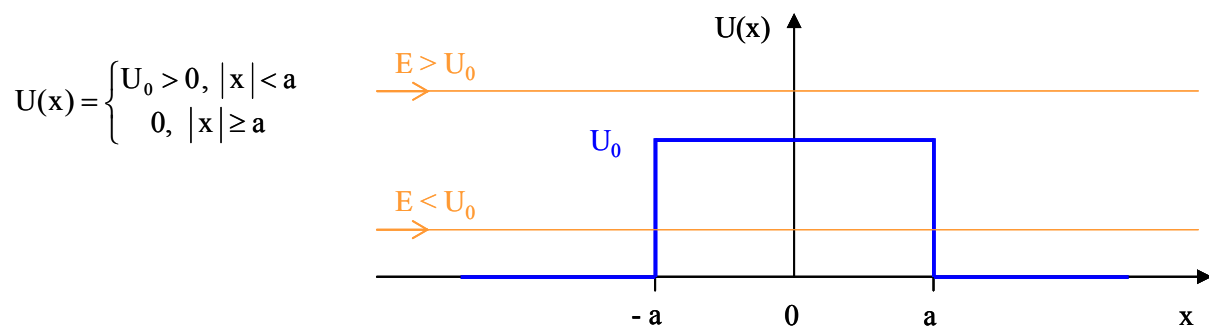
an. Die Eindringtiefe ist um so größer, je stärker sich die Energie E der Barrierenhöhe U_0 nähert.

$$\underline{E > U_0}: \quad R(E) = |\rho|^2 = \left| \frac{k - q}{k + q} \right|^2 \quad \text{und} \quad T(E) := \frac{j_T}{j_0} = \frac{q}{k} |\tau|^2 = \frac{4kq}{(k + q)^2}.$$

→ Das von links einfallende qmT bewegt sich rechts von der Potenzialstufe weiter, wird aber im Gegensatz zur KM auch reflektiert. Die Transmission nimmt mit zunehmender Reflexion ab, denn es ist $R(E) + T(E) = 1$. Diese Relation gilt für alle Teilchenenergien E als Folge der statistischen Interpretation der WF und der daraus folgenden Kontinuitätsgleichung für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ($j_0 = j_R + j_T$). Wir erkennen sofort, dass sie im vorliegenden Fall sowohl für $E > U_0$ als auch für $E < U_0$ erfüllt ist.

2.4 Eindimensionale rechteckige Potenzialbarriere. Tunneleffekt

QmT können in räumliche Bereiche eindringen, in denen eine klassische Bewegung nicht möglich ist und deshalb eine u.U. eine Potentialbarriere endlicher Breite und Höhe überwinden. Wir demonstrieren diesen sogenannten Tunneleffekt am Beispiel einer rechteckigen Potenzialbarriere der Breite $2a$ und der Höhe U_0



Dieser Potenzialverlauf entspricht dem des umgestülpten Potentialtopfes endlicher Tiefe. Während klassische Teilchen mit Energien $E < U_0$ vollständig an den Potenzialwänden reflektiert werden, können qmT die Potenzialbarriere überwinden.

Die Lösung der stationären SG hat für $E < U_0$ die Form

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx}, & x < -a \\ C e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x}, & -a < x < a \text{ mit „Wellenzahlen“ } \hbar k = \sqrt{2mE}, \hbar \kappa = \sqrt{2m(U_0 - E)}. \\ F e^{ikx} + G e^{-ikx}, & a < x \end{cases}$$

Aus den Stetigkeitsforderungen an die Wellenfunktion ergeben sich bei $x = -a$ die Anschlussbedingungen

$$A e^{-ika} + B e^{ika} = C e^{\kappa a} + D e^{-\kappa a}$$

$$ik(A e^{-ika} - B e^{ika}) = -\kappa(C e^{\kappa a} - D e^{-\kappa a})$$

In Matrizen-Form lauten diese beiden Gleichungen

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\kappa a} & e^{-\kappa a} \\ \frac{i\kappa}{k} e^{\kappa a} & -\frac{i\kappa}{k} e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

Wir definieren nun über $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \hat{M}(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$ die sogenannte Transfer-Matrix $\hat{M}(a)$.

Mit Hilfe von \hat{M} lassen sich auch die Anschlussbedingungen am Ort $x = a$ kompakt formulieren $\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \hat{M}(-a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$ und es folgt $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \hat{M}(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \hat{M}(a) \hat{M}^{-1}(-a) \begin{pmatrix} F \\ D \end{pmatrix}$.

Nach einfacher Rechnung finden wir

$$\hat{M}(a) = \begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{ka} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{\kappa a} & e^{\kappa a} \\ \frac{i\kappa}{k} e^{\kappa a} & -\frac{i\kappa}{k} e^{\kappa a} \end{pmatrix} = \dots = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{\kappa a + ika} & \left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a + ika} \\ \left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{\kappa a - ika} & \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a - ika} \end{pmatrix}$$

und daraus

$$\hat{M}(a) \hat{M}^{-1}(-a) = \begin{pmatrix} \cosh(2\kappa a) + i \frac{\varepsilon}{2} \sinh(2\kappa a) e^{2ika} & i \frac{\eta}{2} \sinh(2\kappa a) \\ -i \frac{\eta}{2} \sinh(2\kappa a) & \cosh(2\kappa a) - i \frac{\varepsilon}{2} \sinh(2\kappa a) e^{-2ika} \end{pmatrix}$$

mit den Abkürzungen $\varepsilon := \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}$ und $\eta := \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}$.

Betrachten wir nun den Fall eines von links einfallenden qmT. Dann ist $G = 0$ und es folgt

$$A = \left[\cosh(2\kappa a) + i \frac{\varepsilon}{2} \sinh(2\kappa a) \right] e^{2ika} \cdot F \text{ sowie } B = i \frac{\eta}{2} \sinh(2\kappa a) \cdot F .$$

Über die Wahrscheinlichkeitsstromdichten erhalten wir für den Transmissionskoeffizienten den Ausdruck

$$T(E) = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \dots = \frac{1}{1 + \left(1 + \frac{\varepsilon^2}{4}\right) \sinh^2(2\kappa a)}, \quad E < U_0$$

Was ändert sich im Fall $E > U_0$? Dann ist die WF auch im Intervall $-a < x < a$ oszillierend

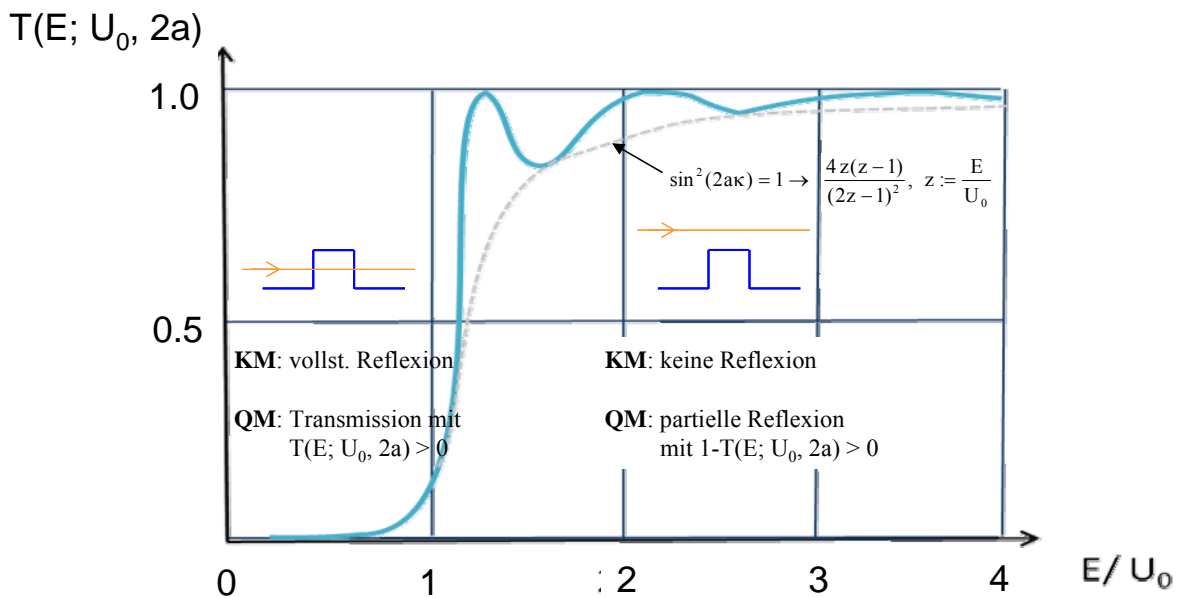
$$\psi(x) = C e^{iqx} + D e^{-iqx}, \quad -a < x < a \quad \text{mit } \hbar q = \sqrt{2m(E - U_0)} \text{ reell.}$$

Also gilt $q = i\kappa$, also $\kappa = -iq$ und es folgt $\sinh(2\kappa a) = \sinh(-2iqa) = -i \sin(2qa)$ wegen $\sinh(iz) = i \sin z$.

Sowohl für $\varepsilon := \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}$ als auch für $\varepsilon = \frac{-iq}{k} - \frac{k}{-iq}$ finden wir $\frac{1}{1 + \frac{\varepsilon^2}{4}} = \frac{4E(U_0 - E)}{U_0^2}$.

Fazit: Der Transmissionskoeffizienten einer rechteckigen Potentialschwelle der Breite $2a$ und der Höhe U_0 ist

$$T(E) = T(E; U_0, a) = \begin{cases} \frac{4E(U_0 - E)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \sinh^2\left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right)}, & E < U_0 \\ \frac{4E(E - U_0)}{4E(E - U_0) + U_0^2 \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}\right)}, & E > U_0 \end{cases}$$



$E < U_0$: Während das klassische Teilchen vollständig an der Potentialschwelle reflektiert wird, überwindet das qmT diese mit einer Transmissionswahrscheinlichkeit $T(E; U_0, 2a) > 0$ → **Tunneleffekt**.

$E > U_0$: KM → keine Reflexion. QM → i.a. partielle Reflexion. Für bestimmte Energiewerte wird das qmT gar nicht reflektiert, nämlich wenn

$$2\kappa a = n\pi, \text{ also } E_n = \underbrace{\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}}_{\text{Bindungszustände im } \infty \text{ tiefen Potenzialtopf}} + U_0, \quad n = 1, 2, \dots$$

T oszilliert zwischen 1 und der gestrichelten Kurve $\frac{4E(E - U_0)}{(2E - U_0)^2}$, die sich für $\sin^2(2a\kappa) = 1$ ergibt.

Einige wenige Beispiele für den Tunneleffekt:

- α -Zerfall (Gamov, 1928)
- kalte Emission von e^- im elektrischen Feld
- Tunneln zwischen zwei durch eine Isolatorschicht getrennten Halbleitern
- Tunneln von Cooper-Paaren in Supraleitern \rightarrow Josephson-Effekt
- Tunnel Elektronenmikroskop
- ...

3. Harmonisch Schwingungen quantenmechanisch (HO: harmonischer Oszillator)

Motivation: Kleine Schwingungen um lokale Gleichgewichtslagen, wie z.B.

- Atom- und Molekülschwingungen
 - Durch Absorption und Emission von Licht Übergänge zwischen verschiedenen Schwingungszuständen → 'scharfe' Spektrallinien
 - Gitterschwingungen im Kristallgitter/Phononen, z.B. 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
 - QED

KM: Klassisches Teilchen führt im Potenzial $U(x) = \frac{k}{2}x^2 = \frac{m\omega^2}{2}x^2$ eindimensionale

harmonische Oszillationen $x(t) = a \cos(\omega t + \varphi)$ aus- $\omega := \sqrt{\frac{k}{m}}$ ist die Kreisfrequenz, die

Werte für die Teilchenenergie $E = \frac{m}{2}\dot{x}^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2 = \dots = \frac{m\omega^2}{2}a^2 \geq 0$ sind kontinuierlich verteilt, $0 \leq E < \infty$.

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

Vorgehensweise klar: Anstelle von $\ddot{x} + \omega^2 x = 0$ ist die Schrödinger-Gleichung (SG) mit $U(x) = 1/2 m\omega^2 x^2$ zu lösen, um die → **Wellenfunktionen** (WF), die dazugehörigen → **Energieniveaus** und → die **Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten** (AWD) des qmT zu bestimmen. 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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \psi = E \psi \rightarrow \text{stationäre SG des HO} \quad (3.1)$$

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

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

Nach Einführung der dimensionslosen Größen

$$y = \frac{x}{b}, \quad b := \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{und} \quad \alpha := \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (3.2)$$

hat (3.1) die Form
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{m\omega} y^2 \psi = \frac{\hbar\omega}{2} \frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{\hbar\omega}{2} y^2 \psi = E\psi \right)$$

$$\underline{\frac{d^2\psi}{dy^2} + (\alpha - y^2)\psi = 0}, \quad \underline{y = \frac{x}{b}}, \quad \underline{b := \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{1}{2}}}, \quad \underline{\alpha := \frac{2E}{\hbar\omega}}. \quad (3.3)$$

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

Die lineare Differentialgleichung (3.3) lösen wir mit der \rightarrow [Sommerfeld'schen Polynom-methode](#): Zunächst wird das asymptotische Verhalten der Lösung für $y \rightarrow \pm\infty$ bestimmt und dann für den nach Abspaltung der Asymptote verbleibenden Rest ein Potenzreihenansatz verwendet.

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

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

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

Wir trennen diese Asymptote mit der Substitution

$$\psi(y) = \tilde{H}(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \quad (3.4)$$

ab. Mit $\psi' = \tilde{H}' e^{-\frac{y^2}{2}} - y\tilde{H} e^{-\frac{y^2}{2}}$, $\psi'' = \tilde{H}'' e^{-\frac{y^2}{2}} - 2y\tilde{H}' e^{-\frac{y^2}{2}} - \tilde{H} e^{-\frac{y^2}{2}} + \tilde{H} y^2 e^{-\frac{y^2}{2}}$ ergibt sich aus (3.3/3.4) für \tilde{H} die Gleichung

$$\tilde{H}'' - 2y\tilde{H}' + (\alpha - 1)\tilde{H} = 0 \quad (3.5)$$

$\tilde{H}(y)$ soll ψ für kleine Werte von y modifizieren, ohne die Asymptote

$\psi(|y| \rightarrow \infty) \sim \exp(-y^2/2)$ zu zerstören. Wir versuchen einen Potenzreihenansatz gemäß

$$\tilde{H}(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k \quad (3.6)$$

(Es wird sich zeigen, dass sich $\tilde{H}(y)$ nur bis auf einen konstanten reellen Faktor von den sogenannten \rightarrow Hermite'schen Polynomen $H(y)$ unterscheidet.) Für die Koeffizienten a_k erhalten wir aus (3.5) unter Berücksichtigung von

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

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

die Relation

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

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

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\alpha}{(k+1)(k+2)} a_k \quad (3.7)$$

für die Koeffizienten in der Potenzreihenentwicklung von $\tilde{H}(y)$ in (3.6). Bei Vorgabe von a_0 und a_1 (den beiden freien Integrationskonstanten der ODE 2. Ordnung (3.5)) erhalten wir rekursiv aus (3.6) alle weiteren Entwicklungskoeffizienten a_k und damit $\tilde{H}(y)$ sowie $\psi(y)$.

Um den Einfluss des Potenzreihenansatzes auf das asymptotische Verhalten von $\psi(y)$ zu untersuchen, betrachten wir große Werte von k . Für diese folgt aus (3.7)

$$a_{k+2} \sim \frac{2}{k} a_k, \text{ und daraus } a_k \sim \frac{1}{\left(\frac{k}{2}\right)!}, \text{ weil gerade dann}$$

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

gilt. Das bedeutet wegen

$$e^{y^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(y^2)^n}{n!} = \sum_{n=\frac{k}{2}}^{\infty} \frac{y^k}{\left(\frac{k}{2}\right)!} \quad \text{aber für } |y| \rightarrow \infty \quad \tilde{H}(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k \sim \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\left(\frac{k}{2}\right)!} y^k \sim e^{y^2}.$$

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

Schlussfolgerung: Um die unverzichtbare Normierbarkeit der WF zu sichern, muss die

Potenzreihe $\tilde{H}(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k$ mit a_k entsprechend (3.7) nach einer endlichen Anzahl von

Termen abbrechen.

Deshalb fordern wir, dass der Zähler von (3.7) ab einem bestimmten Wert von k , sagen wir ab dem Wert $k = n$, Null wird und erhalten

$$\alpha = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{mit} \quad \begin{cases} a_1 = 0, & \text{wenn } n \text{ gerade} \\ a_0 = 0, & \text{wenn } n \text{ ungerade} \end{cases} \quad \text{Abbruchbedingung} \quad (3.8)$$

Mit $\alpha = 2n + 1$ werden alle Koeffizienten a_k für $k \geq n$ Null.

Die Bedingungen $a_0 = 0$ oder $a_1 = 0$ sichern, dass die WF ungerade bzw. gerade Funktionen von x sind; andere Lösungen würden der Bedingung $U(x) = U(-x)$ widersprechen.

- **Energiespektrum des HO**

Für das einer WF $\psi_n(x)$ entsprechende Energieniveau folgt wegen $\alpha := \frac{2E}{\hbar\omega}$ nun aus (3.8)

$$\psi_n(x) \leftrightarrow E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \rightarrow \text{\textbf{äquidistante, diskrete Energieniveaus}} \quad (3.9)$$

Fazit: Wie erwartet, ist das Energiespektrum des qm HO diskret und (im eindimensionalen Fall) nicht entartet. Der Abstand zwischen benachbarten Energieniveaus beträgt $\Delta E = \hbar\omega$, das Spektrum ist also äquidistant. Der Grundzustand liegt bei $E_0 = \hbar\omega/2$, also nicht bei $x = 0$ und $E = 0$ (d.h. $p = 0$), wie im klassischen Fall. Das hängt mit der Unschärferelation zusammen, wie wir im weiteren sehen werden.

- **Explizite Berechnung der WF des HO**

$$\psi(y) \rightarrow \psi_n(y) = \sum_{k=0}^n a_k y^k e^{-\frac{y^2}{2}} \quad \text{mit} \quad a_{k+2} = \frac{2k+1-\alpha}{(k+1)(k+2)} a_k \stackrel{\alpha=2n+1}{=} \frac{2(k-n)}{(k+1)(k+2)} a_k. \quad (3.10)$$

$n = 0$:

Wir wählen $a_1 = 0$, damit sind alle $a_{2k+1} = 0$ und alle ungeraden Potenzen entfallen. Die WF ist gerade und ohne Knoten

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

$n = 1$:

Wir wählen $a_0 = 0$, damit sind alle $a_{2k} = 0$ und alle geraden Potenzen entfallen. Die WF ist ungerade, aus der Rekursionsformel folgt $a_3 = 0$, usw., sie hat einen Knoten

$$\psi_1(y) = a_1 y e^{-\frac{y^2}{2}} = c_1 2y e^{-\frac{y^2}{2}} \rightarrow \text{WF des ersten angeregten Zustands}$$

$n = 2$:

Wähle $a_1 = 0$, damit sind alle $a_{2k+1} = 0$. Die WF ist gerade, besitzt zwei Knoten. Die

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

$$\psi_2(y) = a_0(1-2y^2) e^{-\frac{y^2}{2}} = c_2(4y^2-2) e^{-\frac{y^2}{2}} \rightarrow \text{WF des zweiten angeregten Zustands}$$

$n = 3$:

$a_0 = 0$, also alle $a_{2k} = 0$, WF ungerade, Rekursionsformel führt auf

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

$$\psi_3(y) = a_1 \left(y - \frac{2}{3} y^3 \right) e^{-\frac{y^2}{2}} = c_3 (8y^3 - 12y) e^{-\frac{y^2}{2}} \rightarrow \text{WF des dritten angeregten Zustands}$$

usw.

Alle WF $\psi_n(y)$ sind proportional zu einer Konstanten 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

$$\psi_n(y) = c_n H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \quad \text{mit} \quad H_n(y) := (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} (e^{-y^2}) \quad (3.11)$$

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 (3.5) 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) $y = \frac{x}{b}$, $b := \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}$ 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 Übungsblatt). Insgesamt erhalten wir so folgenden Ausdruck für die normierten WF des eindimensionalen HO

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{WF des 1d HO} \quad (3.12)$$

- **Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten für harmonisch gebundene Quanten**

QM: Aus (3.12) folgt für die Wahrscheinlichkeit $w_n(x)$, ein qmT mit Energie E_n im Intervall $(x, x + dx)$ anzutreffen, der Ausdruck

$$w_n(x) = |\psi_n(x)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2^n n!} \left[H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \right]^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \text{AWD des 1d HO} \quad (3.13)$$

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"

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

Für die Abhängigkeit der Geschwindigkeit v vom Ort x finden ergibt sich mit $x(t) = a \cos(\omega t)$

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

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

Wie erwartet, divergiert w^{kl} an den Umkehrpunkten der klassischen Bewegung, die

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

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

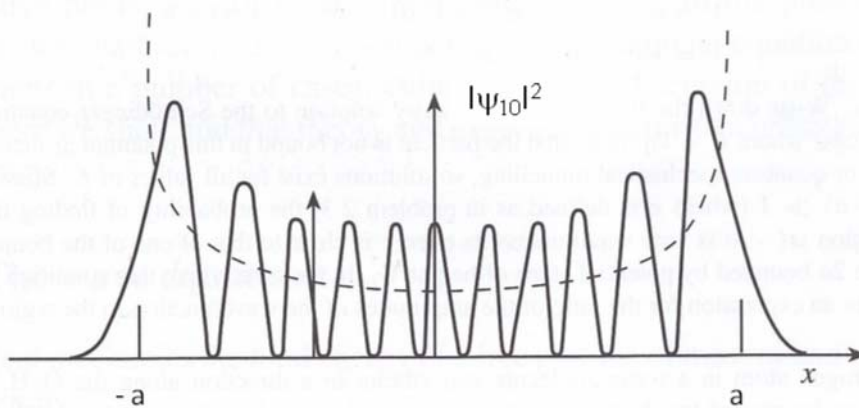
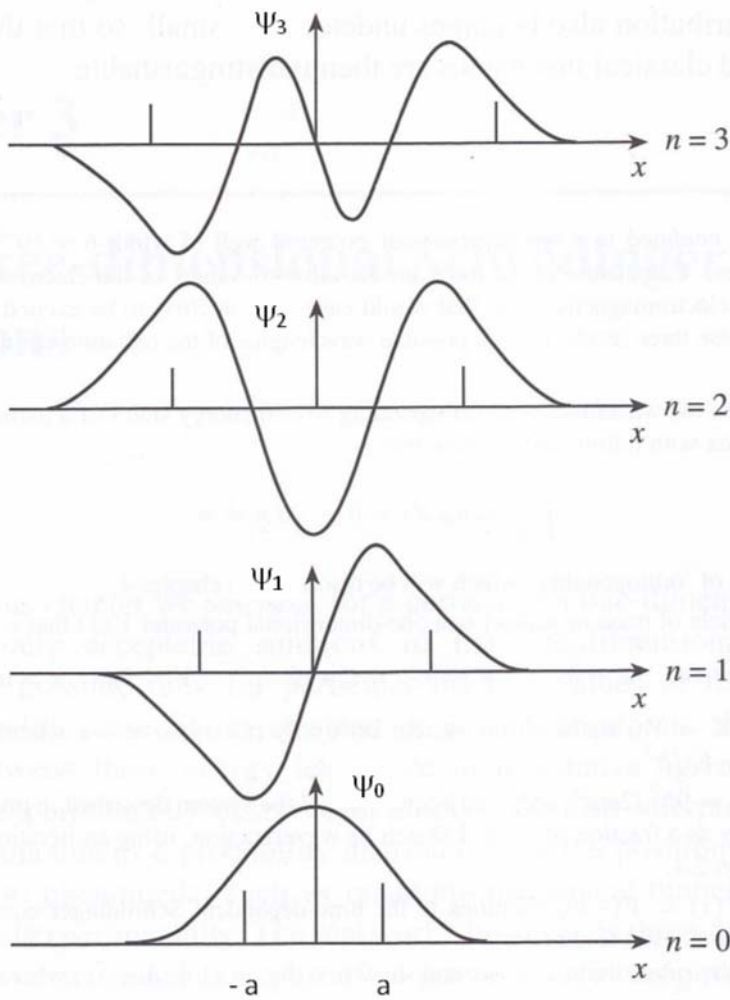
$$(ii) \quad \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} dx w_{\text{kl}}(x) = \frac{\int_{T/2}^{T/2} dt}{T/2} = 1$$

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

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

Für hohe Werte der Quantenzahl n (hoch angeregte Zustände) nähern sich klassische und quantenmechanische AWD an

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



Beachte: (i) WF gerade oder ungerade, Knotensatz erfüllt.

(ii) Oszillierende WF im klassisch erlaubten Bereich der Bewegung.

(iii) Exponentiell abklingende WF im klassisch verbotenen Bereich der Bewegung.

(iv) Mit steigender Quantenzahl n zunehmend stärker ausgeprägten lokalen Maxima von $w_n(x)$ in der Nähe der Umkehrpunkte der klassischen Bewegung.