



## Kapitel 10

# Der quantenmechanische harmonische Oszillator

In diesem Kapitel befassen wir uns mit den quantenmechanischen Eigenschaften eines der grundlegenden Modelle der Physik, dem *harmonischen Oszillator*. Ein harmonischer Oszillator ist ein physikalisches System in dem eine charakteristische Grösse, wie z.B. die Koordinate eines Teilchens, eine sinusförmige Zeitabhängigkeit zeigt, d.h. eine harmonische Schwingung ausführt. Diese Oszillationen werden durch eine in dieser charakteristischen Grösse linearen Rückstellkraft im Zusammenspiel mit der Trägheit des Systems verursacht. In der Natur gibt es sehr viele physikalische Systeme, die in guter Näherung als ein solches lineares Schwingsystem betrachtet werden können: Mechanische Oszillatoren, z.B. das Federpendel, elektrische Oszillatoren, z.B. der LC-Schwingkreis, die Schwingungen zweiatomiger Moleküle oder Gitterschwingungen in einem Festkörper, um nur einige zu nennen.

Hier beginnen wir mit der klassischen Bewegungsgleichung eines harmonischen Oszillators, die wir für das Beispiel des Federpendels formulieren. Es folgt dann die quantenmechanische Behandlung des harmonischen Oszillators, bei der wir die zugehörige Schrödinger-Gleichung lösen. Zum Abschluss des Kapitels vergleichen wir den klassischen mit dem quantenmechanischen Oszillator.

### 10.1 Klassische Bewegungsgleichung

Wir betrachten das in Abb. 10.1 dargestellte Federpendel, in dem ein Teilchen der Masse  $m$  an einer Feder mit Federkonstante  $k$  befestigt ist und Oszillationen um die Ruhelage  $x = 0$  ausführt. Diese Schwingung um die Ruhelage kommt

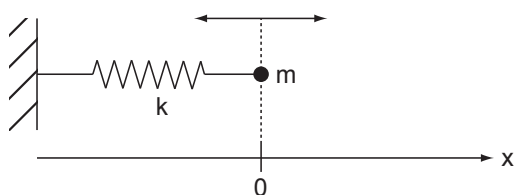


Abb. 10.1: Der harmonische Oszillator: Federpendel.

aufgrund der durch die Feder bewirkten linearen Kraft zustande. Diese Kraft wird *Rückstellkraft* genannt, da sie in jedem Punkt auf der  $x$ -Achse in Richtung Ruhelage zeigt und somit bei einer Auslenkung das Teilchen wieder in Richtung der Ruhelage zwingt. Für ein Federpendel ist diese Rückstellkraft  $F_k$  durch das sogenannte *Hookesche Gesetz* gegeben

$$F_k = -kx. \quad (10.1)$$

Sie ist wie bereits erwähnt linear in der Auslenkung  $x$  aus der Ruhelage. Die klassische Bewegungsgleichung lautet demzufolge

$$m \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + kx = 0. \quad (10.2)$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung ist eine harmonische Schwingung bei der Kreisfrequenz  $\omega = \sqrt{k/m}$

$$x(t) = A \sin(\omega t + \phi) \quad (10.3)$$

mit Amplitude  $A$  und der Phase  $\phi$ , die von den Anfangsbedingungen abhängen. Die Lösung verdeutlicht noch einmal, dass bei einem harmonischen Oszillator die Frequenz  $\nu = \omega/2\pi$  unabhängig von der Amplitude  $A$  ist.

Diese grundlegenden Eigenschaften, die wir am Beispiel des Federpendels kennengelernt haben, liegen allen Systemen, welche durch ein Oszillatormodell beschrieben werden können, zugrunde. Jedes solche System führt eine Oszillation um eine Ruhelage, bewirkt durch eine lineare Rückstellkraft, aus, wobei die Oszillationsfrequenz für genügend kleine Auslenkungen unabhängig von der Amplitude ist.

Wie zu Beginn erwähnt, lassen sich zahlreiche physikalische Systeme angenähert als harmonische Oszillatoren beschreiben. Jedoch sind in realen Systemen die Rückstellkräfte häufig bei grösseren Auslenkungen nicht linear. Diese Nichtlinearität führt zu anharmonischen Oszillationen, bei denen das System Schwingungen bei einer Reihe von Frequenzen ausführt. In anderen Worten ein idealer harmonischer Oszillator, bei dem die Rückstellkraft für beliebig grosse Auslenkungen linear in der Auslenkung aus der Ruhelage ist, existiert nicht. Dennoch kann die Rückstellkraft auch für solche Systeme für genügend kleine Auslenkungen aus der Ruhelage linearisiert werden. Mathematisch bedeutet diese Linearisierung, dass die Rückstellkraft  $F(x)$  um die Ruhelage  $x_0$  bis zum linearen Term (Taylor-)entwickelt wird

$$\begin{aligned} F(x) &= F(x_0) + \left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{x=x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \right|_{x=x_0} (x - x_0)^2 + \dots \\ &\sim \left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{x=x_0} (x - x_0), \end{aligned} \quad (10.4)$$

wobei wir verwendet haben, dass in der Ruhelage  $x_0$  keine Kraft auf das Teilchen wirkt, d.h.  $F(x_0) = 0$ . Wenn alle anderen Terme in dieser Entwicklung ausreichend klein sind, so lässt sich das System in guter Näherung als harmonischer Oszillator beschreiben.

## 10.2 Quantenmechanische Lösung

Nach den klassischen Betrachtungen im letzten Abschnitt kommen wir zur quantenmechanischen Behandlung des harmonischen Oszillators. Wir beginnen mit der Formulierung der Schrödinger-Gleichung.

### 10.2.1 Formulierung der Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x, t) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t). \quad (10.5)$$

Das Potential  $V(x, t)$  (vgl. Abb. 10.2) ergibt sich dabei aus der Integration über die Rückstellkraft  $F_k = -kx$

$$V(x, t) = - \int_0^x F(x') dx' = \int_0^x kx' dx' = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2. \quad (10.6)$$

Wir sehen, dass das Potential zeitunabhängig ist und betrachten deshalb die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} u(x) = Eu(x) \text{ mit } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (10.7)$$

Diese Differentialgleichung lässt sich z.B. mit Hilfe eines Potenzreihenansatzes lösen.

Hier betrachten wir jedoch eine häufig verwendete Lösungsmethode, bei der zunächst sogenannte Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren eingeführt werden. Dazu schreiben wir die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung um, indem wir die beiden Operatoren

$$\hat{b} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{x}{x_0} + x_0 \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (10.8)$$

$$\hat{b}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{x}{x_0} - x_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (10.9)$$

eingeführen, wobei  $x_0 = \sqrt{\hbar/\omega m}$  die Oszillatoramplitude normiert.

Bevor wir die Schrödinger-Gleichung umschreiben, gehen wir zuerst auf einige wichtige Eigenschaften der Operatoren  $\hat{b}$  und  $\hat{b}^\dagger$  ein:

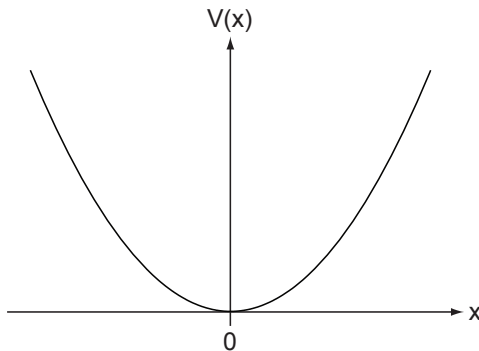


Abb. 10.2: Harmonisches Potential  $V(x) = \omega^2 x^2 / 2$  als Funktion von  $x$ .

- a) Die beiden Operatoren  $\hat{b}$  und  $\hat{b}^\dagger$  sind nicht hermitesch. Jedoch ist  $\hat{b}^\dagger$  der adjungierte Operator zu  $\hat{b}$ :

**Definition 10.1**  $\hat{F}^\dagger$  heisst zu  $\hat{F}$  **adjungierter Operator**, wenn für beliebige Wellenfunktionen  $\psi(x)$  und  $\phi(x)$  gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{F} \phi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{F}^\dagger \psi(x))^* \phi(x) dx. \quad (10.10)$$

Das die Relation (10.10) für die Operatoren  $\hat{b}$  und  $\hat{b}^\dagger$  erfüllt ist, zeigt folgende Rechnung

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{b} \phi(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{x}{x_0} + x_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi(x) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{x}{x_0} \phi(x) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x_0 \frac{\partial}{\partial x} \phi(x) dx \right). \end{aligned} \quad (10.11)$$

Partielle Integration für den zweiten Summanden liefert

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x_0 \frac{\partial}{\partial x} \phi(x) dx = \underbrace{\psi^*(x) x_0 \phi(x) \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty} x_0 \frac{\partial}{\partial x} \psi^*(x) \phi(x) dx \quad (10.12)$$

Einsetzen in (10.11) ergibt

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{b} \phi(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{x}{x_0} - x_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) \right)^* \phi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{b}^\dagger \psi(x))^* \phi(x) dx. \end{aligned} \quad (10.13)$$

- b) Die Operatoren  $\hat{b}$  und  $\hat{b}^\dagger$  erfüllen die folgenden Kommutatorrelationen

$$\begin{aligned} [\hat{b}^\dagger, \hat{b}] \psi(x) &= \hat{b}^\dagger \hat{b} \psi(x) - \hat{b} \hat{b}^\dagger \psi(x) \\ &= \frac{1}{2} \left( \frac{x}{x_0} - x_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \left( \frac{x}{x_0} \psi(x) + x_0 \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left( \frac{x}{x_0} + x_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \left( \frac{x}{x_0} \psi(x) - x_0 \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left( \frac{x^2}{x_0^2} \psi(x) + x \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} - \psi(x) - x \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} - x_0^2 \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial^2 x} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2} \left( \frac{x^2}{x_0^2} \psi(x) - x \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} + \psi(x) + x \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} - x_0^2 \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial^2 x} \right) \\ &= -\psi(x). \end{aligned} \quad (10.14)$$

D.h. es gilt  $[\hat{b}^\dagger, \hat{b}] = -1$ . Analog folgen

$$[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1, \quad (10.15)$$

$$[\hat{b}, \hat{b}] = 0, \quad (10.16)$$

$$[\hat{b}^\dagger, \hat{b}^\dagger] = 0. \quad (10.17)$$

Wir kommen nun zurück zu unserem ursprünglichen Ziel, der Formulierung der Schrödinger-Gleichung (10.7) mit Hilfe der Operatoren  $\hat{b}$  und  $\hat{b}^\dagger$ . Wir berechnen dazu den Ausdruck  $\hbar\omega\hat{b}^\dagger\hat{b}u(x)$ . Es ergibt sich mit  $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$  (vgl. Berechnung (10.14))

$$\begin{aligned}\hbar\omega\hat{b}^\dagger\hat{b}u(x) &= \frac{\hbar\omega}{2} \left( \frac{x^2}{x_0^2}u(x) - u(x) - x_0^2\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}u(x) - \frac{\hbar\omega}{2}u(x).\end{aligned}\quad (10.18)$$

Damit hat die Schrödinger-Gleichung des harmonischen Oszillators ausgedrückt in den Operatoren  $\hat{b}$  und  $\hat{b}^\dagger$  die folgende Form

$$\hbar\omega \left( \hat{b}^\dagger\hat{b} + 1/2 \right) u(x) = Eu(x).\quad (10.19)$$

Wir gehen noch einen Schritt weiter und schreiben

$$\underbrace{\hat{b}^\dagger\hat{b}}_{\equiv \hat{n}} u(x) = \underbrace{\left( \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right)}_{\equiv n} u(x).\quad (10.20)$$

D.h. die Eigenfunktionen  $u(x)$  des Hamiltonoperators sind Eigenfunktionen des Operators  $\hat{n} = \hat{b}^\dagger\hat{b}$  zum Eigenwert  $n = E/(\hbar\omega) - 1/2$ . Später werden wir erkennen, dass der Erwartungswert des Operators  $\hat{n}$  der Anzahl  $n$  der Quanten  $\hbar\omega$  des harmonischen Oszillators entspricht.

Unser nächstes Ziel ist nun die Bestimmung der Eigenfunktionen  $u_n(x)$  und der entsprechenden Eigenwerte  $n$  des Operators  $\hat{n}$ . Die Eigenfunktionen  $u_n(x)$  sind identisch mit denen des Hamiltonoperators und die entsprechenden Energieeigenwerte  $E_n$  ergeben sich dann zu

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right).\quad (10.21)$$

Dabei haben wir die Quantenzahl  $n$  für die Eigenfunktionen  $u_n(x)$  und die Energieeigenwerte  $E_n$  eingeführt.

### 10.2.2 Berechnung des Grundzustands

Wir bestimmen den Grundzustand des Operators  $\hat{n}$ , d.h. die Eigenfunktion  $u_n(x)$  zum niedrigstmöglichen Eigenwert  $n$ . Dazu müssen wir als erstes den niedrigstmöglichen Eigenwert bestimmen. Da der Operator  $\hat{b}^\dagger$  der adjungierte Operator von  $\hat{b}$  ist, gilt

$$\begin{aligned}n &= n \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x)u_n(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x)nu_n(x)dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x)\hat{n}u_n(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x)\hat{b}^\dagger\hat{b}u_n(x)dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{b}u_n(x))^* \hat{b}u_n(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{b}u_n(x)|^2 dx \\ &\geq 0.\end{aligned}\quad (10.22)$$

Demzufolge ist der niedrigstmögliche Eigenwert  $n = 0$ . Nach (10.22) muss dann für die entsprechende Eigenfunktion  $u_0(x)$  gelten  $\hat{b}u_0(x) = 0$ , d.h. wir erhalten folgende Differentialgleichung zur Bestimmung des Grundzustands  $u_0(x)$

$$\left(\frac{x}{x_0^2} + \frac{\partial}{\partial x}\right)u_0(x) = 0. \quad (10.23)$$

Wir wählen den Ansatz  $u_0(x) = e^{sx^2}$  und erhalten für die Bestimmung der Konstanten  $s$  die Gleichung  $1/x_0^2 + 2s = 0$  mit der Lösung  $s = -1/2x_0^2$ . Damit ergibt sich

$$u_0(x) = Ce^{-1/2(x/x_0)^2}. \quad (10.24)$$

Die Konstante  $C$  ergibt sich aus der Normierungsbedingung

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} u_0^*(x)u_0(x)dx = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x/x_0)^2} dx = C^2 \sqrt{\pi}x_0 \quad (10.25)$$

zu  $C = (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2}$ . Damit erhalten wir für den Grundzustand  $u_0(x)$  den folgenden Ausdruck (vgl. Abb. 10.3)

$$u_0(x) = (\sqrt{\pi}x_0)^{-1/2} e^{-1/2(x/x_0)^2}. \quad (10.26)$$

### 10.2.3 Berechnung der restlichen Eigenzustände

Zur Bestimmung der weiteren Eigenfunktionen  $u_n(x)$  zeigen wir zwei kleine Sätze.

**Satz 10.1** *Ist  $u_n(x)$  Eigenfunktion von  $\hat{n}$  zum Eigenwert  $n$ , so ist  $\hat{b}u_n(x)$  eine Eigenfunktionfunktion von  $\hat{n}$  zum Eigenwert  $n-1$ , d.h. der Operator  $\hat{b}$  erniedrigt*

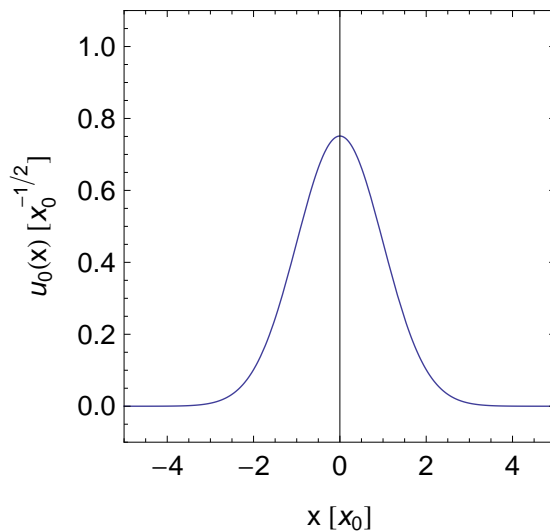


Abb. 10.3: Der Grundzustand des harmonischen Oszillators  $u_0(x)$  als Funktion von  $x$ .

den Eigenwert  $n$  um 1. Daher wird  $\hat{b}$  **Vernichtungsoperator** genannt. Für die normierte Eigenfunktion  $u_{n-1}(x)$  gilt

$$u_{n-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{b} u_n(x), \quad n \geq 1. \quad (10.27)$$

*Beweis:*

Wir wenden den Operator  $\hat{b}$  auf die Eigenwertgleichung (10.20) an

$$\hat{b} \hat{n} u_n(x) = \hat{b} n u_n(x). \quad (10.28)$$

Mit  $\hat{n} = \hat{b}^\dagger \hat{b}$  und (10.15) erhalten wir

$$\hat{n} \hat{b} u_n(x) = (n-1) \hat{b} u_n(x). \quad (10.29)$$

Mit

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{b} u_n(x))^* (\hat{b} u_n(x)) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)^* \hat{b}^\dagger \hat{b} u_n(x) dx \\ &= n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)^* u_n(x) dx}_{=1} \\ &= n \end{aligned} \quad (10.30)$$

folgt für die normierte Eigenfunktion  $u_{n-1}(x)$

$$u_{n-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{b} u_n(x), \quad n \geq 1. \quad (10.31)$$

□

Der entsprechende Satz für den Operator  $\hat{b}^\dagger$  lautet:

**Satz 10.2** Ist  $u_n(x)$  Eigenfunktion von  $\hat{n}$  zum Eigenwert  $n$ , so ist  $\hat{b}^\dagger u_n(x)$  eine Eigenfunktion von  $\hat{n}$  zum Eigenwert  $n+1$ , d.h. der Operator  $\hat{b}^\dagger$  erhöht den Eigenwert  $n$  um 1. Daher wird  $\hat{b}^\dagger$  **Erzeugungsoperator** genannt. Für die normierte Eigenfunktion  $u_{n+1}(x)$  gilt

$$u_{n+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{b}^\dagger u_n(x), \quad n \geq 0. \quad (10.32)$$

*Beweis:*

Wir wenden den Operator  $\hat{b}^\dagger$  auf die Eigenwertgleichung (10.20) an

$$\hat{b}^\dagger \hat{n} u_n(x) = \hat{b}^\dagger n u_n(x). \quad (10.33)$$

Mit  $\hat{n} = \hat{b}^\dagger \hat{b}$  und (10.14) erhalten wir

$$\hat{n} \hat{b}^\dagger u_n(x) = (n+1) \hat{b}^\dagger u_n(x). \quad (10.34)$$



Mit

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\hat{b}^\dagger u_n(x)\right)^* \left(\hat{b}^\dagger u_n(x)\right) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)^* \hat{b} \hat{b}^\dagger u_n(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)^* \left(\hat{b}^\dagger \hat{b} + 1\right) u_n(x) dx \end{aligned} \quad (10.35)$$

$$\begin{aligned} &= (n+1) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)^* u_n(x) dx}_{=1} \\ &= n+1 \end{aligned} \quad (10.36)$$

folgt für die normierte Eigenfunktion  $u_{n+1}(x)$

$$u_{n+1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{b}^\dagger u_n(x), \quad n \geq 0. \quad (10.37)$$

□

Nach Satz 10.2 ergeben sich nun die Eigenfunktionen  $u_n(x)$  zu den Eigenwerten  $n = 1, 2, 3, \dots$  durch Anwendung von  $\hat{b}^\dagger$  auf  $u_0(x)$

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{b}^\dagger u_{n-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{b}^\dagger\right)^n u_0(x), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (10.38)$$

Wir zeigen nun, dass wir damit alle Eigenfunktionen gefunden haben, d.h. wir beweisen den folgenden Satz:

**Satz 10.3** Mit  $u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{b}^\dagger\right)^n u_0(x)$ ,  $n \in \mathbb{N}_0$ , haben wir alle Eigenfunktionen des Operators  $\hat{n}$  gefunden.

*Widerspruchsbeweis:*

Wir nehmen an, dass ein Eigenwert  $n = m + \alpha$  mit  $0 < \alpha < 1$  und  $m \in \mathbb{N}$  existiert und zeigen, dass diese Annahme auf einen Widerspruch führt. Die Eigenwertgleichung lautet

$$\hat{n} u_n(x) = (m + \alpha) u_n(x). \quad (10.39)$$

Mit (10.27) folgt

$$\hat{n} \left(\hat{b}^m u_n(x)\right) = \alpha \left(\hat{b}^m u_n(x)\right), \quad (10.40)$$

$$\hat{n} \left(\hat{b}^{m+1} u_n(x)\right) = \underbrace{(\alpha - 1)}_{<0} \left(\hat{b}^{m+1} u_n(x)\right). \quad (10.41)$$

Dies steht im Widerspruch zur Positivität der Eigenwerte von  $\hat{n}$ .

□

#### 10.2.4 Zusammenfassung der Lösung - Hermite-Polynome

Fassen wir die Abschnitte 10.2.2 und 10.2.3 zusammen:

Die Eigenfunktionen  $u_n(x)$  des Hamiltonoperators des harmonischen Oszillators lauten

$$u_n(x) = (n! \sqrt{\pi} x_0)^{-1/2} (\hat{b}^\dagger)^n e^{-1/2(x/x_0)^2}, \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (10.42)$$

mit den Energieeigenwerten

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (10.43)$$

Insbesondere sind die Eigenfunktionen  $u_n(x)$  reell und je grösser die Anzahl der Nullstellen der Eigenfunktionen ist, umso höher liegt der entsprechende Energieeigenwert. Diese Regel gilt allgemein bei eindimensionalen Problemen.

Die Eigenfunktionen  $u_n(x)$  lassen sich durch die sogenannten *Hermite-Polynome*  $H_n(x)$  ausdrücken. Es gilt

$$u_n(x) = (2^n n! \sqrt{\pi} x_0)^{-1/2} e^{-1/2(x/x_0)^2} H_n(x/x_0), \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad (10.44)$$

wobei die Hermite-Polynome  $H_n(x)$  gegeben sind durch

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-x^2}. \quad (10.45)$$

In Tab. 10.1 sind die ersten sechs Polynome  $H_n(x)$  zusammen mit den Energieeigenwerten  $E_n$  des harmonischen Oszillators aufgelistet und in Abb. 10.4 die entsprechenden Eigenfunktionen  $u_n(x)$  gezeichnet. Wir gehen nun kurz auf ein paar Eigenschaften der Hermite-Polynome ein.

### Eigenschaften der Hermite-Polynome

Die Hermite-Polynome erfüllen die folgenden Eigenschaften:

#### 1. Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{mn}. \quad (10.46)$$

#### 2. Erzeugende Funktion

$$e^{-t^2+2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} t^n H_n(x). \quad (10.47)$$

#### 3. Differentialgleichung

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2x \frac{\partial}{\partial x} + 2n \right) H_n(x) = 0. \quad (10.48)$$

#### 4. Rekursionsformel

$$x H_n(x) = n H_{n-1}(x) + \frac{1}{2} H_{n+1}(x). \quad (10.49)$$

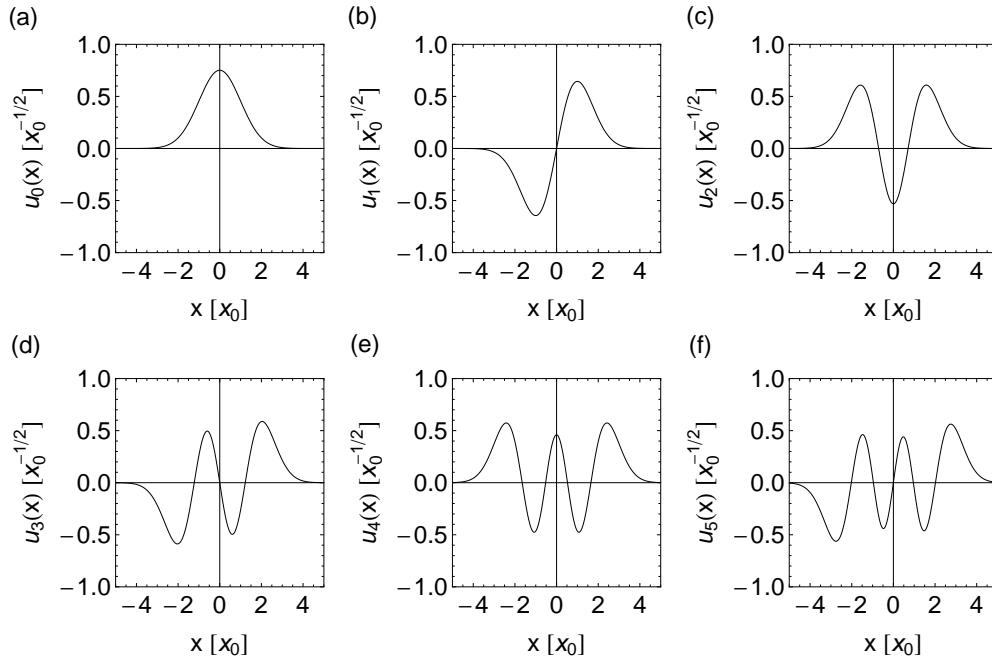


Abb. 10.4: Die Eigenfunktionen  $u_n(x)$  des harmonischen Oszillators für die Quantenzahlen (a)  $n = 0$ , (b)  $n = 1$ , (c)  $n = 2$ , (d)  $n = 3$ , (e)  $n = 4$  und (f)  $n = 5$  als Funktion der Ortskoordinate  $x$ .

$n$	$H_n(x)$	$E_n$
0	1	$\frac{1}{2}\hbar\omega$
1	$2x$	$\frac{3}{2}\hbar\omega$
2	$4x^2 - 2$	$\frac{5}{2}\hbar\omega$
3	$8x^3 - 12x$	$\frac{7}{2}\hbar\omega$
4	$16x^4 - 48x^2 + 12$	$\frac{9}{2}\hbar\omega$
5	$32x^5 - 160x^3 + 120x$	$\frac{11}{2}\hbar\omega$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$n$	$(-1)^n e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-x^2}$	$\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$

Tab. 10.1: Übersicht über die Hermite-Polynome  $H_n(x)$  und die entsprechenden Energieeigenwerten  $E_n$  des harmonischen Oszillators.

### 10.2.5 Die Nullpunktenergie

Die niedrigste Energie des harmonischen Oszillators ist klassisch  $E = 0$ , quantenmechanisch  $E = \hbar\omega/2$ , d.h. im Gegensatz zur klassischen Mechanik erhalten wir in der Quantenmechanik eine endliche Grundzustandsenergie, auch *Nullpunktenergie* genannt. In diesem Abschnitt gehen wir nun genauer auf diese Nullpunktenergie ein.

Wir bestimmen als erstes die Orts- und Impulsunschärfe  $\Delta x$  und  $\Delta p$ . Für

den Erwartungswert  $\langle x \rangle$  des Ortes erhalten wir

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) x u_n(x) dx \propto \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) (\hat{b} + \hat{b}^\dagger) u_n(x) dx = 0. \quad (10.50)$$

Demzufolge ergibt sich für die Ortsunschärfe  $\Delta x$

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} \\ &= \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) x^2 u_n(x) dx} \\ &= \sqrt{\frac{x_0^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) (\hat{b}^2 + \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^{\dagger 2}) u_n(x) dx} \\ &= \sqrt{\frac{x_0^2}{2} (0 + (n+1) + n + 0)} = x_0 \sqrt{n + \frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (10.51)$$

Analog erhalten wir für den Erwartungswert des Impulses  $\langle p \rangle$  und die Impulsunschärfe  $\Delta p$

$$\langle p \rangle = 0 \quad (10.52)$$

$$\Delta p = \frac{\hbar}{x_0} \sqrt{n + \frac{1}{2}}. \quad (10.53)$$

Damit erhalten wir im Grundzustand für die Orts- und Impulsunschärfe

$$\Delta x = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \quad (10.54)$$

$$\Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}x_0}. \quad (10.55)$$

Somit ist das Teilchen im Grundzustand nicht auf  $x = 0$  konzentriert, sondern ist über einen endlichen Bereich verschmiert, verbunden mit einem endlichen Impuls. Diesen Sachverhalt wird *Nullpunktschwankung* genannt.

Wir leiten zusätzlich eine Ungleichung für die Nullpunktsenergie ausgehend von der Unschärferelation

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (10.56)$$

her. Die Wellenfunktion werden wir dazu nicht explizit berechnen. Aus Symmetriegründen gilt für den Grundzustand  $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$  und somit

$$\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (10.57)$$

Damit erhalten wir für die Energie die folgende Ungleichung

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle \geq \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\langle p^2 \rangle}. \quad (10.58)$$

Wir bestimmen das Minimum der rechten Seite der Ungleichung indem wir die Ableitung nach  $\langle p^2 \rangle$  null setzen

$$\frac{1}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{(\langle p^2 \rangle_{\min})^2} = 0. \quad (10.59)$$

Auflösen nach  $\langle p^2 \rangle_{\min}$  ergibt

$$\langle p^2 \rangle_{\min} = \frac{m\hbar\omega}{2}. \quad (10.60)$$

Damit lautet die Ungleichung für die Energie

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{2}. \quad (10.61)$$

Somit wird klar, dass die Nullpunktsenergie der kleinste Energiewert ist, der mit der Unschärferelation vereinbar ist.

### 10.2.6 Kohärente Zustände

Für die stationären Lösungen  $u_n(x)$  gilt nach (10.50)  $\langle x \rangle = 0$ , d.h. in diesen stationären Zuständen führt der harmonische Oszillator einzeln keine Oszillation aus. Sie haben daher insbesondere nichts mit der klassischen Oszillationsbewegung gemeinsam. Das Ziel ist es nun Lösungen der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung zu bestimmen, die eine periodische Oszillation darstellen, d.h. Zustände in denen der Erwartungswert des Ortes nicht verschwindet, sondern bzgl. der Zeitabhängigkeit mit der klassischen Oszillationsbewegung übereinstimmt. Wir gehen dazu von den Eigenzuständen  $\phi_\alpha(x)$  des Vernichtungsoperators  $\hat{b}$  aus

$$\hat{b}\phi_\alpha(x) = \alpha\phi_\alpha(x) \text{ mit } \alpha \in \mathbb{C}. \quad (10.62)$$

Wir entwickeln diese Zustände  $\phi_\alpha(x)$  nach den stationären Zuständen  $u_n(x)$ . Nach Abschnitt 9.5.7 erhalten wir

$$\phi_\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x), \quad (10.63)$$

wobei für die Entwicklungskoeffizienten  $c_n$  mit (9.278), (10.38), (10.62) und der Eigenschaft, dass  $\hat{b}$  der adjungierte Operator von  $\hat{b}^\dagger$  ist, gilt

$$\begin{aligned} c_n &= \int_{-\infty}^{\infty} u_n(x)\phi_\alpha(x)dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{b}^\dagger\right)^n u_0(x)\phi_\alpha(x)dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} u_0(x)\hat{b}^n \phi_\alpha(x)dx \\ &= \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} u_0(x)\phi_\alpha(x)dx}_{\equiv C}. \end{aligned} \quad (10.64)$$

Damit folgt

$$\phi_\alpha(x) = C \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} u_n(x). \quad (10.65)$$

Die Konstante  $C$  ergibt sich aus der Normierungsbedingung

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi_\alpha^*(x) \phi_\alpha(x) dx \\ &= C^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \\ &= C^2 e^{|\alpha|^2}. \end{aligned} \quad (10.66)$$

Damit erhalten wir

$$C = e^{-|\alpha|^2/2}. \quad (10.67)$$

Einsetzen in (10.65) liefert für die Zustände  $\phi_\alpha$  die folgende Entwicklung

$$\phi_\alpha(x) = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} u_n(x). \quad (10.68)$$

Die Zustände  $\phi_\alpha(x, t)$  erhalten wir durch die Zeitentwicklung der stationären Zustände  $u_n(x)$

$$\phi_\alpha(x, t) = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (10.69)$$

Mit  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$  ergibt sich

$$\phi_\alpha(x, t) = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} u_n(x) e^{-i\omega t/2}. \quad (10.70)$$

Die Zustände  $\phi_\alpha(x, t)$  werden *kohärente Zustände*<sup>1</sup> genannt und sind Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung. Für den Erwartungswert  $\langle x \rangle$  ergibt sich mit  $\alpha \equiv |\alpha| e^{i\delta}$

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi_\alpha^*(x, t) x \phi_\alpha(x, t) dx \\ &= \frac{x_0}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_\alpha^*(x, t) (\hat{b} + \hat{b}^\dagger) \phi_\alpha(x, t) dx \\ &= \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\alpha e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t}) \\ &= \frac{x_0}{\sqrt{2}} |\alpha| \left( e^{-i(\omega t - \delta)} + e^{i(\omega t - \delta)} \right) \\ &= \sqrt{2} x_0 |\alpha| \cos(\omega t - \delta). \end{aligned} \quad (10.71)$$

D.h. der Erwartungswert des Ortes führt eine periodische Oszillation aus. Wir haben also mit diesen kohärenten Zuständen, Zustände des harmonischen Oszillators gefunden, in denen der Erwartungswert des Ortes die selbe Zeitabhängigkeit wie die klassische Schwingung zeigt.

<sup>1</sup>Der Name kommt daher, da in der Optik die Zustände  $\phi_\alpha(x, t)$  eine wichtige Rolle für die Darstellung von kohärenten Lichtwellen spielen.

### 10.3 Vergleich klassischer - quantenmechanischer harmonischer Oszillator

Zum Abschluss dieses Kapitels vergleichen wir den quantenmechanischen mit dem klassischen harmonischen Oszillator. Die klassische Bewegung ist beschrieben durch

$$x(t) = q_0 \sin(\omega t), \quad (10.72)$$

$$E = \frac{1}{2} m \omega^2 q_0^2, \quad (10.73)$$

wobei  $q_0$  die Amplitude der Schwingung bezeichnet. Die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $W_{\text{klass}}(x)dx$  das Teilchen im Intervall  $[x, x + dx]$  anzutreffen, ist gegeben durch

$$W_{\text{klass}}(x)dx = \frac{dt}{T/2}, \quad (10.74)$$

wobei  $dt$  die Aufenthaltsdauer in  $dx$  und  $T = 2\pi/\omega$  die Periode ist. Mit (10.72) erhalten wir für  $dx$  den Ausdruck

$$dx = q_0 \omega \cos(\omega t) dt = q_0 \omega \sqrt{1 - (x/q_0)^2} dt. \quad (10.75)$$

Einsetzen in (10.74) ergibt

$$W_{\text{klass}}(x) = \frac{1}{\pi q_0 \sqrt{1 - (x/q_0)^2}}. \quad (10.76)$$

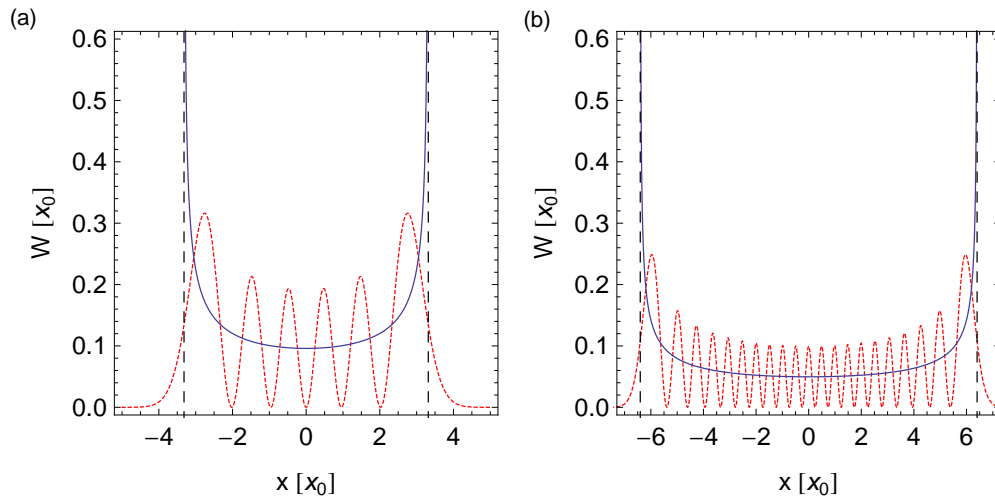


Abb. 10.5: Die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|u_n(x)|^2$  (rot gepunktete Linie) und die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $W_{\text{klass}}(x)$  (blaue durchgezogene Linie) als Funktion der Ortskoordinate  $x$  für die Quantenzahlen (a)  $n = 5$  und (b)  $n = 20$ . Die schwarz gestrichelten Linien markieren die klassischen Umkehrpunkte bei  $x = \pm q_0$ .

In Abb. 10.5 ist die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|u_n(x)|^2$  für die Quantenzahlen  $n = 5$  und  $n = 20$  zusammen mit der entsprechenden klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $W_{\text{klass}}(x)$  dargestellt. Die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $W_{\text{klass}}(x)$  nimmt gegen die Umkehrpunkte  $x = \pm q_0$  monoton zu (da sie umgekehrt proportional zur Geschwindigkeit ist). Die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|u_n(x)|^2$  oszilliert, wobei die Höhe der Maxima gegen die klassischen Umkehrpunkte zunimmt. Quantenmechanisch existiert zusätzlich eine endliche Wahrscheinlichkeit das Teilchen bei Amplituden grösser als den klassischen Umkehrpunkten  $x = \pm q_0$  anzutreffen. Für sehr hohe Quantenzahlen  $n$  nähert sich die quantenmechanische der klassischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit an. Die Oszillationen werden immer schwächer und die Wahrscheinlichkeit das Teilchen bei Amplituden grösser als den klassischen Umkehrpunkten  $x = \pm q_0$  anzutreffen sinkt.



# Literaturverzeichnis

- [1] F. Pedrotti, L. Pedrotti, W. Bausch, und H. Schmidt, *Optik für Ingenieure, Grundlagen*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2005.
- [2] A.H. Compton, Phys. Rev. **21**, 483 (1923).
- [3] [http://www.satgeo.de/satgeo/quicklooks/methoden/fe\\_physik.htm](http://www.satgeo.de/satgeo/quicklooks/methoden/fe_physik.htm), 27.10.2010.
- [4] <http://de.wikipedia.org/wiki/Sonne>, 27.10.2010.
- [5] <http://de.wikipedia.org/wiki/Sonnenradius>, 27.10.2010.
- [6] <http://de.wikipedia.org/wiki/Emissionsgrad>, 27.10.2010.
- [7] <http://www.periodensystem.info/download/>, 22.02.2011.
- [8] H. Haken, und H. Wolf, *Atom- und Quantenphysik, Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2004.
- [9] <http://www2.selu.edu/Academics/Faculty/delbers/emission-spectra-1.jpg>, 14.01.2011.
- [10] F. Schwabl, *Quantenmechanik (QM I), Eine Einführung*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2002.
- [11] A. Goldberg, H.M. Schey, und J.L. Schwartz, American Journal of Physics **35**, 177 (1967).
- [12] J. Jackson, *Klassische Elektrodynamik*, de Gruyter, Berlin, 2006.