

Wiederholung Transmissions- und Reflektionskoeffizient an rechteckiger Potenzialbarriere

klassisch: $T_{\text{klass}}(E) = \begin{cases} 0, & E < U_0 \\ 1, & E > U_0 \end{cases}$

quantenmechanisch: Wir gehen zurück zu (2.6)

$$T(E) = \frac{1}{1 + \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4}\right) \sinh^2(2\kappa a)} = \frac{4E(U_0 - E)}{4E(U_0 - E) + U_0^2 \sinh^2\left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right)}, \quad E < U_0.$$

Da $\sinh(2\kappa a) := \frac{1}{2}(e^{2\kappa a} - e^{-2\kappa a})$, folgt für $e^{-2\kappa a} \ll e^{2\kappa a}$, also $1 \ll e^{4\kappa a}$, $\sinh^2(2\kappa a) \sim \frac{1}{4}e^{4\kappa a}$.

In gleicher Näherung kann die Eins im Nenner von $T(E)$ vernachlässigt werden. Also ist

$$T(E) \sim \frac{4E(U_0 - E)}{U_0^2} \exp\left(-\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right) = T_0 \exp\left(-\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right), \quad E < U_0.$$

Wie erwartet wird, die Überwindung der Potenzialbarriere erleichtert, wenn man

- ihre Breite $2a$ verringert,
- ihre Höhe U_0 verringert und/oder
- E in die Nähe von U_0 bringt.

Für eine kontinuierliche Potenzialbarriere $U(x)$ können wir nun wie folgt vorgehen: Wir zerlegen $U(x)$ in N Abschnitte der Breite $2a = dx$. In der betrachteten Näherung erhalten wir dann für den Transmissionskoeffizienten durch $U(x)$

$$T_{U(x)}(E) \sim (T_0)^N \prod_{i=1}^N \exp\left(-\frac{2dx}{\hbar} \sqrt{2m[U(x) - E]}\right) = (T_0)^N \exp\left\{\sum_{i=1}^N -\frac{2dx}{\hbar} \sqrt{2m[U(x) - E]}\right\}$$

Im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ wird $\sum_{i=1}^N \text{bei } x=a \text{ bis } x=b$ zu $\int_a^b dx$, also

$$T_{U(x)}(E) \sim \exp\left\{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b dx \sqrt{2m[U(x) - E]}\right\}. \quad (2.7)$$

Der Tunneleffekt ist vor allem dann relevant, wenn $T(E)$ "nicht zu klein" wird, also etwa für $\frac{2 \cdot 2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \approx 1$. Diese Bedingung ist nur in atomaren Bereichen erfüllt.

□ Beispiel: Elektron mit $m_e \approx 10^{-27}$ g für $2a \approx 10^{-9}$ nm und $U_0 - E \approx 10$ eV führt auf $T/T_0 \approx 1/e \approx 0.37$. Für $2a \approx 10$ nm ergäbe sich trotz der kleinen Masse des Elektrons schon eine Tunnelwahrscheinlichkeit von $T/T_0 \approx 10^{-8}$, bei größeren Teilchenmassen entsprechend noch weniger ...

Der Tunneleffekt ist ein typisches Quantenphänomen, das im "quasiklassischen Grenzübergang $\hbar \rightarrow 0$ " verschwindet.

Bemerkungen außerhalb des regulären Kurses:

(i) Zum gleichen Ergebnis (2.7) gelangt man im Rahmen der "quasiklassischen" WKB-Näherung (**Wentzel-Kramers-Brillouin**), vgl. z.B. L^2 , Bd III, §§ 46, 50.

(ii) Gültigkeit der quasiklassischen Näherung erfordert $\left| \frac{dU}{dx} \right| \lambda_{\text{Broglie}} \ll \frac{p^2}{2m}$ - die Änderung der potenziellen Energie auf Längen von der Größenordnung der de-Broglie Länge muss viel kleiner als die kinetische Energie des Teilchens sein. Da $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{p} \hbar$ folgt

$$\left| \frac{dU}{dx} \right| m \hbar \ll p^3.$$

In der Nähe der Umkehrpunkte $x_0 : U(x_0) = E$ der klassischen Bewegung ist diese Bedingung nicht erfüllt, da dort $p \rightarrow 0$. Ausweg: Linearisiere $U(x) \sim U(x_0) + U'(x_0)(x - x_0)$, löse die stationäre Schrödingergleichung für $U(x) = a \cdot x$ und verknüpfe die Lösung mit der quasiklassischen Näherung in den Raumbereichen, wo sie anwendbar ist.

3. Harmonisch Schwingungen quantenmechanisch (harmonischer Oszillator, I)

- **Motivation**

Kleine Schwingungen um lokale Gleichgewichtslagen, z.B.

- Atom- und Molekülschwingungen (Schwingungs- und Rotationsspektren)

Übergänge zwischen diskreten Energieniveaus unterschiedlicher Schwingungszustände erzeugen scharfe Spektrallinien. Die Frequenzen absorbierter oder emittierter Photonen sind Vielfache von $\hbar\omega$.

- Gitterschwingungen in Festkörpern → Phononen.

Wärmekapazität fester Körper bei niedrigen Temperaturen $c(T \rightarrow 0) \sim T^3$ (P. Debye)

- Quantisierung des elektromagnetischen Feldes

→ spektrale Energieverteilung der Hohlraumstrahlung Planck, 1900

- ...

Problem: Analysiere die eindimensionale Bewegung eines Teilchens mit potenzieller Energie

$$U(x) = \frac{k}{2} x^2 = \frac{m\omega^2}{2} x^2.$$

klassisch: Das Teilchen führt harmonische Oszillationen

$$x(t) = a \cos(\omega t + \varphi), \quad \omega := \sqrt{\frac{k}{m}} \text{ ist die Kreisfrequenz.}$$

aus, die Lösung der Bewegungsgleichung $\ddot{x} + \omega^2 x = 0$ sind. Amplitude a und Phase φ werden aus den beiden Anfangsbedingungen ermittelt. Die Energie E des Teilchens

$$E = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 = \dots = \frac{m\omega^2}{2} a^2 \geq 0, \quad 0 \leq E < \infty$$

kann alle Werte zwischen Null und Unendlich annehmen. Es handelt sich um eine finite

Bewegung, deren Umkehrpunkte x_0 sich aus $E = \frac{m\omega^2}{2} x_0^2$ ergeben.

quantenmechanisch: Anstelle von $\ddot{x} + \omega^2 x = 0$ ist die Schrödinger-Gleichung (SG) mit $U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ zu lösen, um die Wellenfunktionen (WF), die dazugehörigen Energie-niveaus und die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten (AWD) des Teilchens zu bestimmen. Wir erwarten diskrete Energieniveaus und Eindringen des Teilchens in den klassisch verbotenen Ortsbereich mit $E < U(x)$.

Das Potenzial $U(x)$ hängt nicht explizit von der Zeit ab, also gilt $\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$. Die AWD ist nicht zeitabhängig. $\psi(x)$ genügt der Gleichung

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

Die gesuchten Lösungen sind nicht entartet und wegen $U(x) = U(-x)$ entweder gerade oder ungerade Funktionen von x . Sie müssen normierbar sein.

• Lösung der stationären SG für den HO mit der Sommerfeld'schen Polynom-Methode

Nach Einführung der dimensionslosen Größen

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

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 und α bestimmen die charakteristische Längen- bzw. Energieskala des harmonischen Oszillators.

Die lineare Differentialgleichung (3.3) lösen wir in zwei Schritten: Zunächst wird 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 Potenzreihenansatz verwendet. Dieses Verfahren heißt Sommerfeld'sche Polynom-Methode.

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

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

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

Wir trennen diese Asymptote mit der Substitution

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

ab. Für die unbekannte Funktion $\tilde{H}(y)$ erhalten wir nach einfacher Rechnung

$$\psi' = \tilde{H}' e^{-\frac{y^2}{2}} - y \tilde{H} e^{-\frac{y^2}{2}}, \quad \psi'' = \tilde{H}'' e^{-\frac{y^2}{2}} - 2y \tilde{H}' e^{-\frac{y^2}{2}} - \tilde{H} e^{-\frac{y^2}{2}} + \tilde{H} y^2 e^{-\frac{y^2}{2}}$$
 aus (3.3) die ODE

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

$\tilde{H}(y)$ soll $\psi(y)$ für kleine y -Werte modifizieren, ohne das asymptotische Verhalten

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

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

Für die Koeffizienten a_k erhalten wir aus (3.5) unter Berücksichtigung von

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

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

die Relation

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

Wegen der linearen Unabhängigkeit der y^k folgt daraus für die Koeffizienten in der

Potenzreihenentwicklung von $\tilde{H}(y)$ in (3.6) die Rekursionsformel

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

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

Beachte: Für große Werte von k ergibt sich aus (3.7) $\underline{a_{k+2} \sim \frac{2}{k} a_k}$. Daraus folgt $a_k \sim \frac{1}{\left(\frac{k}{2}\right)!}$,

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

Das bedeutet für $|y| \rightarrow \infty$ aber wegen $e^{y^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(y^2)^n}{n!} = \sum_{n=\frac{k}{2}}^{\infty} \frac{y^k}{\left(\frac{k}{2}\right)!}$

$$\tilde{H}(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k \sim \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\left(\frac{k}{2}\right)!} y^k \sim e^{y^2}.$$

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

Schlussfolgerung: Um die Normierbarkeit der Wellenfunktion zu sichern, muss die

Potenzreihe $\tilde{H}(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k$ mit den Koeffizienten 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

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

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.

Aus (3.8) folgt unter Berücksichtigung von (3.2) $\alpha = 2n + 1 = \frac{2E}{\hbar\omega}$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad \underline{\text{Spektrum harmonischer Oszillator}} \quad (1D) \quad (3.9)$$

Fazit: Wie erwartet, ist das Energiespektrum des harmonischen Oszillators diskret und (im eindimensionalen Fall) nicht entartet. Der Abstand zwischen benachbarten Energieniveaus beträgt $\Delta E := E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$, das Spektrum ist also äquidistant.

Der Grundzustand liegt bei $E_0 = \hbar\omega/2$, also nicht wie im klassischen Fall bei $x = 0$ und $E = 0$ (d.h. $p = 0$). Das hängt mit der Unschärferelation zusammen, wie wir im Weiteren sehen werden.

- **Explizite Berechnung der Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators**

Aus (3.4) und (3.6) folgt unter Verwendung der Abbruchsbedingung (3.7) der allgemeine Ausdruck

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

für die Wellenfunktion $\psi_n(y)$ zum Energieniveau E_n . Wir werden feststellen, dass die Quantenzahl n mit der Anzahl der Knoten von $\psi_n(y)$ übereinstimmt (Knotensatz).

$n = 0$:

Wir wählen $a_1 = 0$, damit sind alle $a_{2k+1} = 0$ und alle ungeraden Potenzen entfallen. Es folgt

$$\underline{\psi_0(y)} = a_0 e^{-\frac{y^2}{2}} =: \underline{c_0 e^{-\frac{y^2}{2}}}, \quad \underline{E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega} \rightarrow \underline{\text{Grundzustand}}$$

Die WF des Grundzustands ist gerade und ohne Knoten.

$n = 1$:

Wir wählen $a_0 = 0$, damit sind alle $a_{2k} = 0$, alle geraden Potenzen entfallen.

Aus der Rekursionsformel folgt $a_3 = 0$, usw.

$$\underline{\psi_1(y)} = a_1 y e^{-\frac{y^2}{2}} =: \underline{2c_1 y e^{-\frac{y^2}{2}}}, \quad \underline{E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega} \rightarrow \underline{\text{erster angeregter Zustand}}$$

Die WF des ersten angeregten Zustands ist ungerade mit einem Knoten.

n = 2:

Wähle $a_1 = 0$, d.h., alle $a_{2k+1} = 0$. Aus der Rekursionsformel $\rightarrow a_2 = \frac{2(0-2)}{(0+1)(0+2)} a_0 = -2a_0$.

$$\underline{\psi_2(y)} = a_0(1-2y^2) e^{-\frac{y^2}{2}} =: \underline{c_2(4y^2-2) e^{-\frac{y^2}{2}}}, \quad \underline{E_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega} \rightarrow \underline{\text{zweiter angeregter Zustand}}$$

Die WF des zweiten angeregten Zustands ist gerade und besitzt zwei Knoten.

n = 3:

$a_0 = 0 \rightarrow$ alle $a_{2k} = 0$; aus der Rekursionsformel $\rightarrow a_3 = \frac{2(1-3)}{(1+1)(1+2)} a_1 = -\frac{4}{2 \cdot 3} a_1 = -\frac{2}{3} a_1$.

$$\underline{\psi_3(y)} = a_1 \left(y - \frac{2}{3} y^3 \right) e^{-\frac{y^2}{2}} =: \underline{c_3(8y^3-12y) e^{-\frac{y^2}{2}}}, \quad \underline{E_3 = \frac{7}{2} \hbar \omega} \rightarrow \underline{\text{dritter angeregter Zustand}}$$

Die WF des dritten angeregten Zustands ist ungerade und besitzt drei Knoten, usw.

Wir haben alle $\psi_n(y)$ mit einer $\psi_n(y)$ Konstanten c_n multipliziert

$$c_0 = a_0, \quad c_1 = \frac{a_1}{2}, \quad c_2 = -2a_0, \quad c_3 = -12a_1.$$

Diese Konstanten sind so gewählt, dass die Relation

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

erfüllt ist. 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.

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

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	$2n + 1 - x^2$	$\exp(-x^2/2) H_n(x)$

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).

Bemerkung: Alternativ zu der rekursiven Bestimmung von c_n (\rightarrow Übungsblatt) lassen sich die zu berechnenden Ausdrücke auf das Integral

$$\int_0^{\infty} dy y^n e^{-r^2 y^2} = \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{2r^{\frac{n+1}{2}}}, \quad n+1, r > 0.$$

Dabei ist $\Gamma(x) := \int_0^{\infty} dt e^{-t} t^{x-1}$ mit $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$, x reell, die Gamma-Funktion.

Für natürliche Zahlen $x = n$ ist $\Gamma(n+1) = n!$ - die Gamma-Funktion verallgemeinert die Definition von $n! := n \cdot (n-1) \cdot (n-2) \cdot \dots \cdot 2 \cdot 1$ auf reelle Zahlen x . Grafik von $\Gamma(x)$ siehe z.B. Bronstein, S. 155.

Insgesamt erhalten wir abschließend für die normierten Wellenfunktionen $\psi_n(x)$ des eindimensionalen harmonischen Oszillators zum Energieniveau E_n

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

- **Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten für harmonisch gebundene Quanten**

Aus (3.12) folgt für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $w_n(x)$ des Teilchen im Zustand mit der Energie der Ausdruck

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

In der klassischen Mechanik ist die Wahrscheinlichkeit $w_{kl}(x) \cdot dx$, das klassische Teilchen an einem Punkt x aus dem Intervall $(x, x + dx)$ anzutreffen proportional zum Zeitintervall dt , in dem das Teilchen die Strecke dx durchläuft. Da jedes Intervall dx pro Periode T zweimal durchlaufen wird, folgt für ein klassisch betrachtetes Teilchens (Massepunkt an Pendel)

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

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

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

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

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

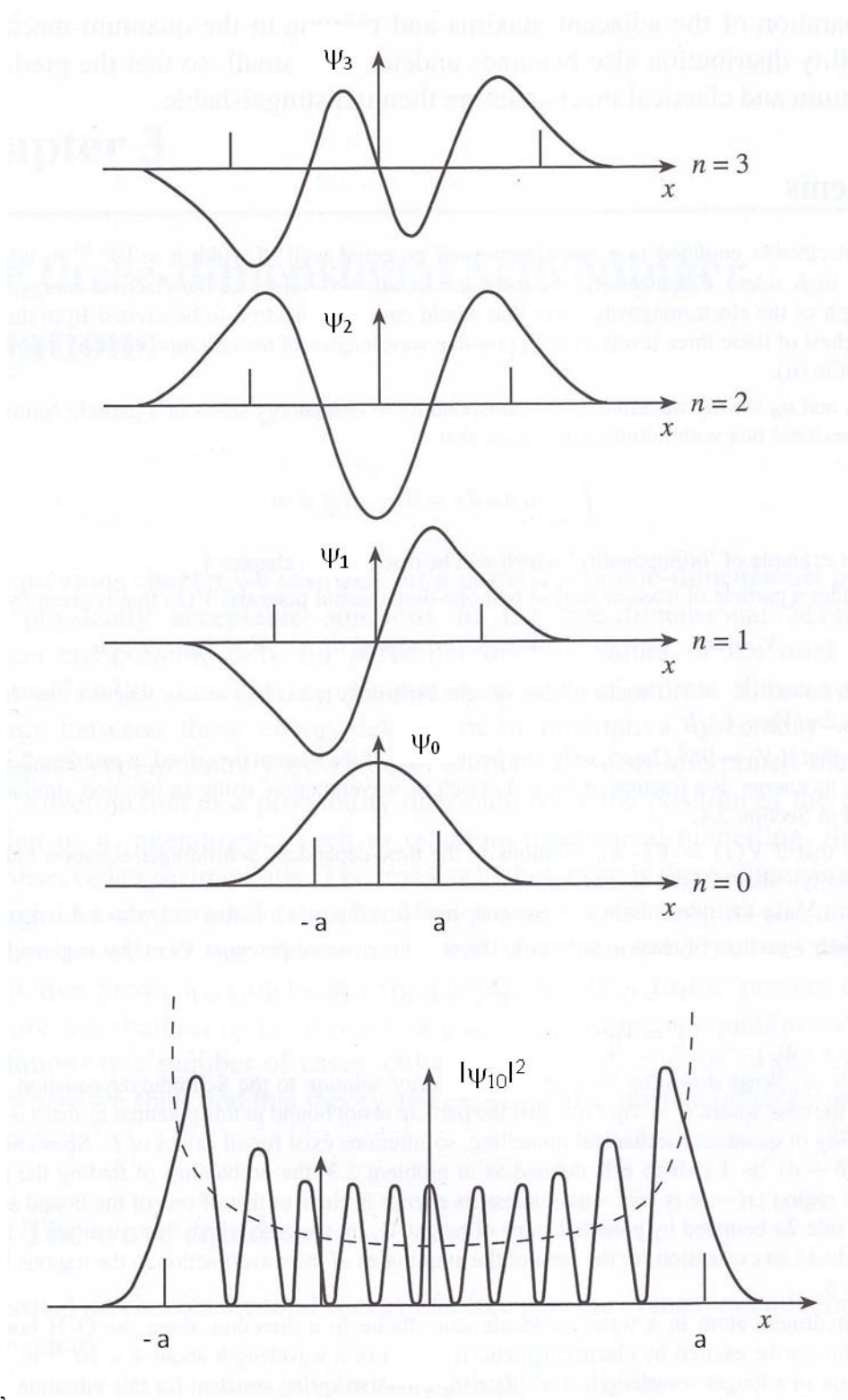
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx w_{kl}(x) = \int_{-a}^a dx \frac{1}{\pi \sqrt{a^2 - x^2}} = \frac{1}{\pi} \arcsin\left(\frac{x}{a}\right) \Big|_{-a}^a = \frac{1}{\pi} [\arcsin(1) - \arcsin(-1)] = \frac{1}{\pi} \left[\frac{\pi}{2} - \left(-\frac{\pi}{2}\right) \right] = 1$$

Für die Schwingungsamplitude a folgt $E = \frac{m}{2} v^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 = \frac{m}{2} a^2 \omega^2$, also $a = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$.

Für hoch angeregte Zustände (Quantenzahl n groß) nähern sich "klassische" und quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte an, d.h. (vgl. Skizze folgende Seite)

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

" $\hbar \rightarrow 0$ "



Skizze zeigt

- dass die Wellenfunktionen gerade oder ungerade sind, Knotensatz ist erfüllt,
- oszillierende (exponentiell abklingende) Wellenfunktionen im klassisch erlaubten (verbotenen) Bereich der Bewegung,
- mit steigender Quantenzahl n zunehmend stärker ausgeprägten lokalen Maxima von $w_n(x)$ in der Nähe der Umkehrpunkte der klassischen Bewegung

Wir wollen uns abschließend noch davon überzeugen, dass Hermite'schen Polynome mit unterschiedlicher Quantenzahl n orthogonal sind:

$$\left. \begin{aligned} \psi_1''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_1 - U(x)] \psi_1(x) &= 0 \\ \psi_k''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E_k - U(x)] \psi_k(x) &= 0 \end{aligned} \right| \begin{array}{l} \psi_k \\ -\psi_1 \end{array}$$

$$\psi_k \psi_1'' - \psi_1 \psi_k'' = \frac{d}{dx} (\psi_k \psi_1' - \psi_1 \psi_k') = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_1) \psi_k \psi_1$$

Nach Integration beider Seiten in $[a, b]$ folgt $\psi_k \psi_1' \Big|_a^b - \psi_1 \psi_k' \Big|_a^b = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_1) \int_a^b dx \psi_k \psi_1$.

Offensichtlich haben wir $\psi_k(x), \psi_1(x) \rightarrow 0$ für $x \rightarrow \infty$. Damit folgt im Grenzfall $a \rightarrow -\infty$ und $b \rightarrow \infty$

$$0 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_1) \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_k(x) \psi_1(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_k - E_1) \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!} H_k\left(\frac{x}{b}\right) H_1\left(\frac{x}{b}\right) e^{-\frac{x^2}{b^2}}$$

und damit auch $\int_{-\infty}^{\infty} dx H_k(x) H_1(x) \begin{cases} = 0 & \text{für } k \neq 1 \\ \neq 0 & \text{für } k = 1 \end{cases}$.

Schlussfolgerung: Die Hermite'schen Polynome bilden auf dem Intervall $-\infty < x < \infty$ ein vollständiges Orthogonalsystem von Funktionen mit der Gewichtsfunktion e^{-x^2} .

□ Beispiel: Isotroper dreidimensionaler harmonischer Oszillator:

Dann ist $U(\mathbf{r}) = \frac{m\omega^2}{2}r^2$ und die stationäre Schrödinger-Gleichung lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2 + z^2)\Psi = E\Psi.$$

Sie lässt sich über den Separationsansatz

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

lösen, denn die $\Psi_{n_i}(x_i)$ sind die Wellenfunktionen des 1D HO (nachprüfen). Die

Energieniveaus

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

sind nun (bis auf den Grundzustand $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$) entartet, denn E_n hängt nur von der Summe

$n_x + n_y + n_z = n$ ab. Dem ersten angeregten Zustand $E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ entsprechen die drei WF

Ψ_{100} , Ψ_{010} , Ψ_{001} , dem zweiten angeregten Zustand die sechs WF Ψ_{200} , Ψ_{020} , ... Ψ_{110} , ... usw.

Der Entartungsgrad g_n des Zustands mit der Energie E_n ist

$$g_n = \sum_{n_1=0}^n (n - n_1 - 1) = \frac{(n+1)(n+2)}{2},$$

Ursache der Entartung ist die Rotationssymmetrie des Potentials $U(\mathbf{r})$.