Mit derselben Rechnung wie in B) erhält man, anstelle von (2.74):

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{\lambda}{k} + \frac{k}{\lambda}\right)^2 \sinh^2 2\lambda a} \tag{2.75}$$

Trägt man dies in Einheiten $\frac{E}{V_0}$ auf so erhält man Abbildung 2.29. Der Bereich $[0, 1]$ ist blau eingefärbt. Hier ist die Energie kleiner als das Potentialmaximum. Man erkennt eine schwach ansteigende Transmissionswahrscheinlichkeit in diesem Teil. Der rot gefärbte Teil mit $E > V_0$ ist uns bereits aus B) bekannt.

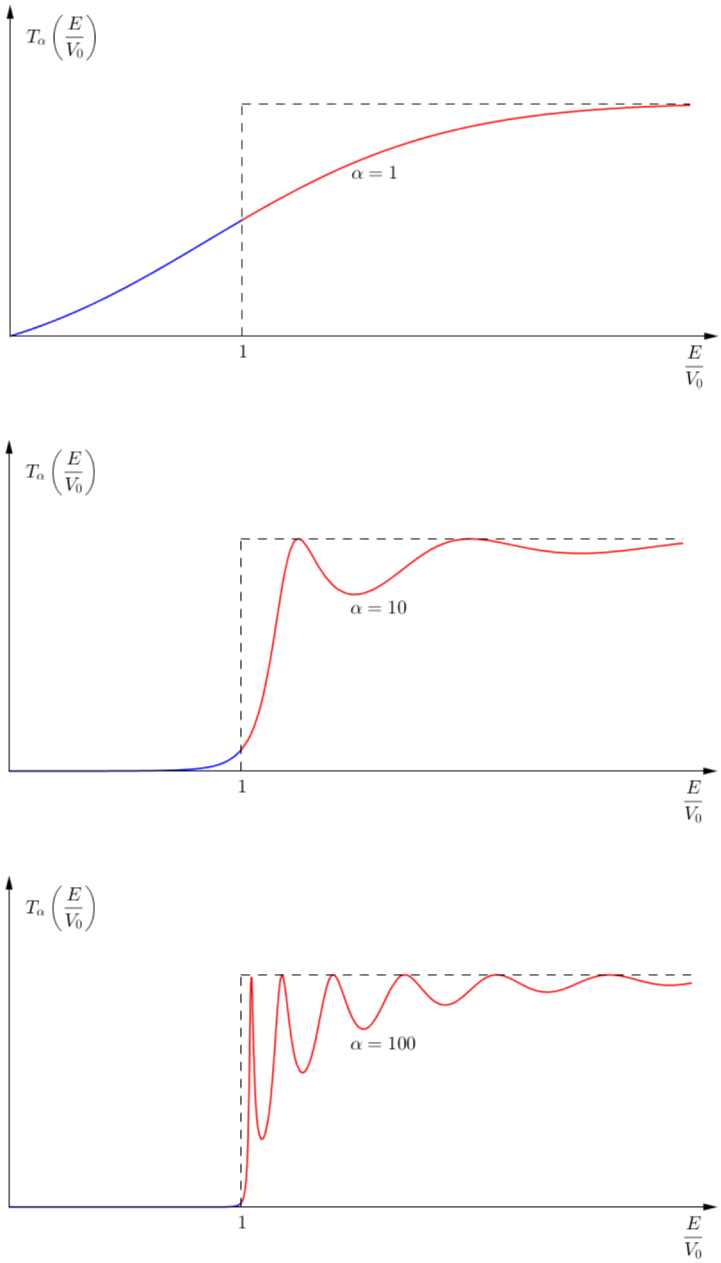


Abbildung 2.29: Transmissions-Koeffizient an einer Potentialschwelle der Höhe V_0, für drei verschiedene Werte $\alpha = V_0/T_0$. Hier haben wir wieder als Einheit der kinetischen Energie $T_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ benutzt.

Der klassische Fall ist gestrichelt eingetragen. Der Parameter $\alpha = \frac{V_0}{T_0} \propto V_0 \cdot a^2$ gibt Höhe und Breite der Potentialbarriere an. Ist α größer, so ist die Tunnelwahrscheinlichkeit geringer.

Hierbei war T_0:

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}.$$

Betrachten wir nun den Grenzfall

$$\lambda a = \sqrt{\frac{V_0}{T_0} - \frac{E}{T_0}} \gg 1,$$

was für $V_0 \gg E$ und $V_0 \gg T_0$ der Fall ist. Hier sind die Quanteneffekte dann schwach, und es gilt

$$\sinh 2\lambda a \approx \frac{1}{2} e^{2\lambda a},$$

d.h. der Transmissionkoeffizient ist exponentiell klein.

$$T \to \frac{16k^2\lambda^2}{(k^2+\lambda^2} e^{-4\lambda a}.$$

Setzt man λ und k ein, so erhält man:

$$T(E) = 16\frac{E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-4\sqrt{\frac{V_0-E}{T_0}}}. \tag{2.76}$$

Verallgemeinerung auf beliebige Barrieren: Das Rechteckpotential war bisher nur die erste grobe Näherung eines realen Potentials. Wir können nun auch den Tunneleffekt durch eine beliebig geformte Potentialstufe $V(x)$ untersuchen. Dazu unterteilen wir die Stufe in äquidistante Rechtecke mit der Breite

$$a = \Delta x_i, \quad i = 1, ..., N,$$

wie in Abbildung 2.30 skizziert.

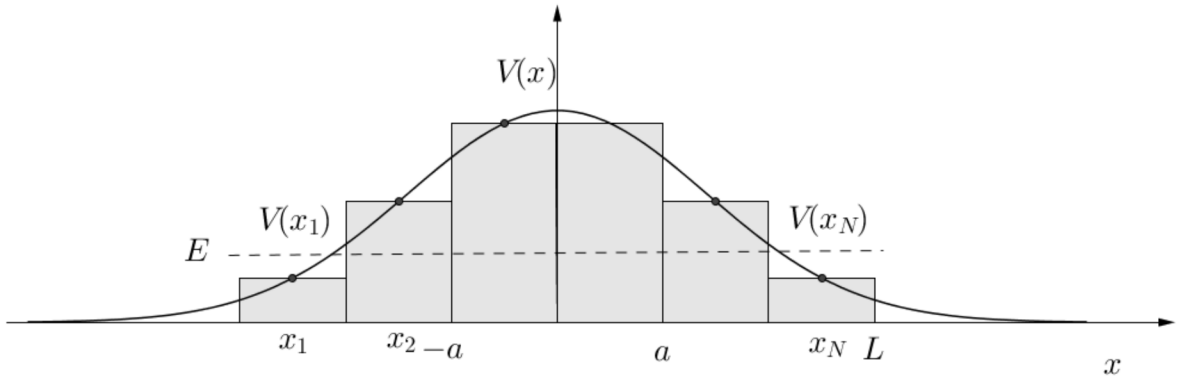


Abbildung 2.30: Annäherung eines allgemeinen Potentials durch Rechteck-Potentiale.

Der Transmissionskoeffizient ist nun gegeben durch Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen durch alle Rechtecke nacheinander transmittiert wird. Mathematisch erfordert das die Berechnung des

Produktes der Transmissionswahrscheinlichkeiten durch die einzelnen Rechtecke:

$$\begin{aligned} T(E) &= \prod_{i=1}^{N} T_i(E) \\ &= \text{const} \cdot e^{-\frac{2}{\hbar}\sum\limits_{i=1}^{N}\sqrt{2m[V(x_i)-E]}\cdot\Delta x_i} \\ &\longrightarrow \text{const} \cdot e^{-\frac{2}{\hbar}\int\limits_{0}^{L} dx\,\sqrt{2m[V(x)-E]}} \end{aligned}$$

Im zweiten Schritt haben wir Δx_i gegen 0 gehen lassen. Damit lässt sich die Transmissionswahrscheinlichkeit durch ein beliebig geformtes Potential berechnenen, unter der Annahme, dass die Teilchenenergie klein ist. Einen ähnlichen Ausdruck findet man auch in der klassischen Mechanik bei der Bewegung eines Teilchens im Potential $V(x)$. In der Tat ist dieses Resultat der Spezialfall einer systematischen quasiklassischen Theorie (Wentzels-Kramers-Brillouin-Theorie, WKB), in der auch die Vorfaktoren korrekt bestimmt werden.

2.8.4 Fazit

Wir fassen noch einmal die wichtigsten Punkte dieses Themas zusammen:

- Das Kastenpotential in Form eines Topfes oder einer Schwelle enthält alle typischen Eigenschaften eines Mikroteilchens in einem externen Potential.

- ψ_E wird aus den Teillösungen konstruiert, und diese werden durch die Randbedingungen, dass $\psi(x)$ und $\psi'(x)$ stetig sind, verknüpft (Ausnahme ist der Fall eines unendlich tiefen Potentials).

- Es liegen diskrete und kontinuierliche Energie-Eigenwerte vor, wobei der erste Fall zu einer gebundenen Bewegung korrespondiert und in einem Kasten auftritt, wenn die Energie unterhalb des Potentialmaximums liegt.

- Transmission und Reflexion verlaufen drastisch verschieden zur klassischen Theorie.

In der unten stehenden Grafik sind noch einmal die Sachverhalte gemeinsam veranschaulicht.

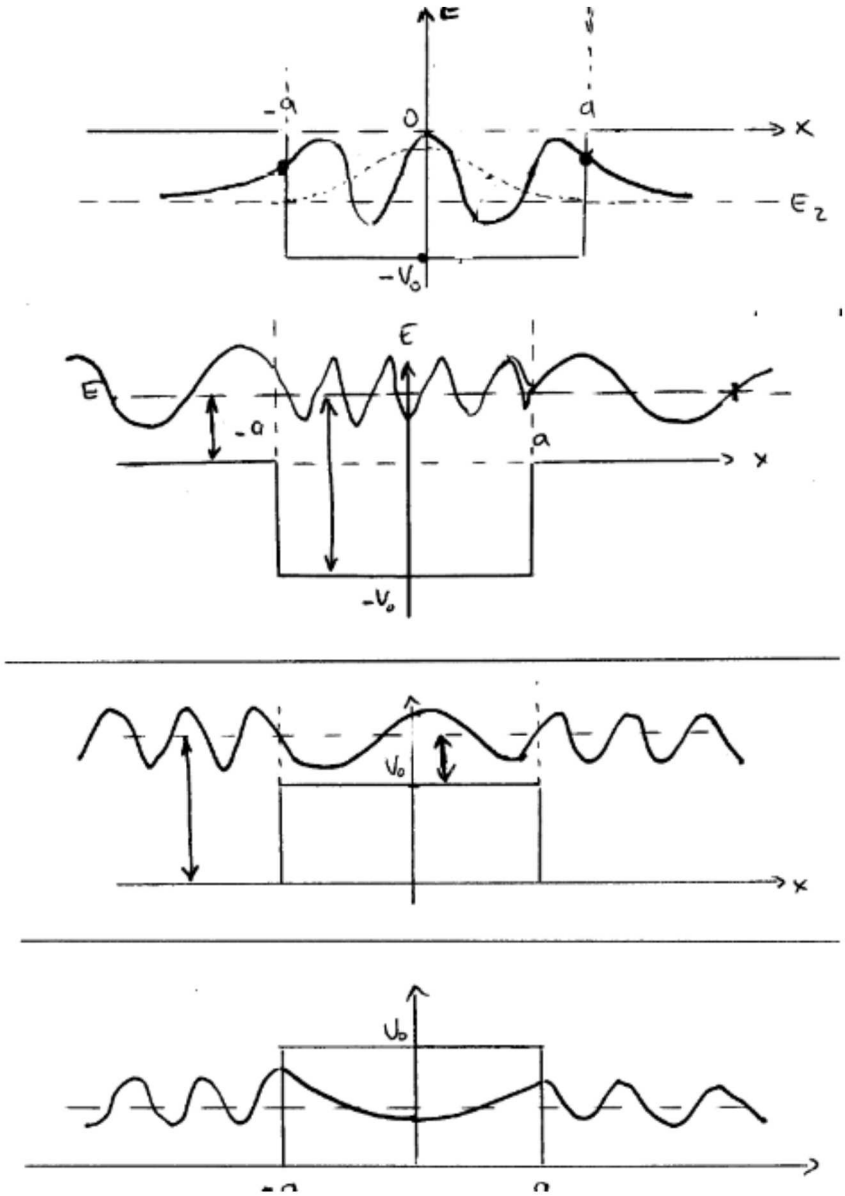


Abbildung 2.31: Vergleich der Wellenfunktionen für ein rechteckiges Potential endlicher Höhe bzw. Tiefe (schematisch). Von oben nach unten: Potentialtopf–Fälle B1), B2) und Potentialschwelle–C1) und C2). Die allgemeine Form der Schrödingergleichung lautet in jedem Teilbereich $\psi'' + k^2\psi = 0$, mit $k^2 = [E - V(x)]/T_0$, und $T_0 = \hbar^2/(2ma^2)$.

2.9 Der harmonische Oszillator

2.9.1 Einführung

Wir wenden uns nun einem realistischeren Einschluss-Potential zu – dem parabolischen Potential des harmonischen Oszillators, das ein häufig anzutreffender Fall ist. Darüber hinaus kann es als Grenzfall einer Taylor-Entwicklung allgemeiner Potentiale mit einem Minimum (wir wählen $x = 0$) betrachtet werden:

$$V(x) = V(0) + \frac{dV}{dx}\Big|_0 \cdot x + \frac{1}{2}\frac{d^2V}{dx^2}\Big|_0 \cdot x^2 + ...$$

Ist $|V'''(0)|x \ll |V''(0)|$, so kann diese harmonische Näherung angewendet werden. Dies ist oft zutreffend bei hinreichend kleiner Auslenkung aus der Gleichgewichtslage, die durch

$$\frac{dV}{dx}\Big|_0 = -F(0) = 0,$$

beschrieben wird. Im Folgenden werden wir, ohne Beschränkung der Allgemeinheit, von $V(0) = 0$ ausgehen, da sich die Energieskale beliebig verschieben lässt.

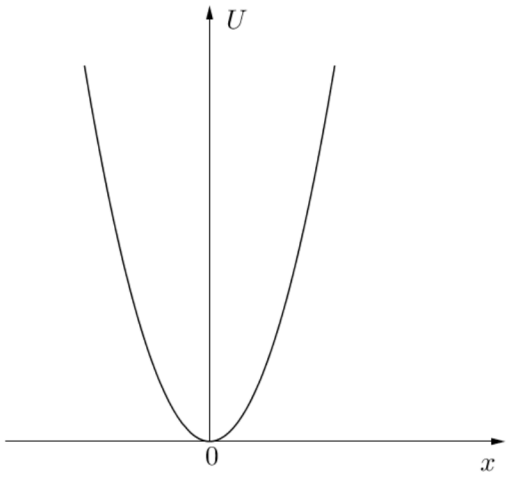


Abbildung 2.32: Parabolisches Potential $U(x)$.

Beispiele für harmonische Oszillatoren sind:

- kleine Schwingungen in Festkörpern (Phononen),
- Molekülschwingungen,
- Confinement-Potential in Elementarteilchen (Quarks),
- Teilchen in optischen Gittern.

Wir werden das allgemeine harmonische Oszillatorpotential der Form

$$V(x) = \frac{\alpha}{2}x^2\,,$$

jetzt untersuchen. Erinnern wir uns zunächst an den klassischen Oszillator: er wird durch die klassische Hamiltonfunktion

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2, \tag{2.77}$$

beschrieben, wobei ω die Eigenfrequenz ist, mit:

$$\omega = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}\,.$$

Die Lösung der Newtonschen Gleichung mit der rücktreibenden Kraft $F = -\frac{d}{dx}V(x) = -m\omega^2 x$ sind Schwingungen um die Ruhelage mit der Frequenz ω.

2.9.2 Lösung der stationären Schrödingergleichung. Sommerfeld–Polynom-Methode

In der Quantenmechanik erwarten wir, dass der Hamilton-Operator $\hat{H}$ eine analoge Form wie (2.77) besitzt:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2, \tag{2.78}$$

mit dem Unterschied, dass sowohl Ort als auch Impuls jetzt als Operatoren zu verstehen sind. Die stationäre Schrödinger-Gleichung, also das Eigenwertproblem, ist wie gewohnt:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{m}{2}\omega^2 x^2\psi = E\psi. \tag{2.79}$$

Hier haben wir stillschweigend $\hat{x}$ durch x ersetzt, da dies der Schrödingergleichung entspricht, die wir vorher betrachtet haben. Wir werden später sehen, dass dies ein Spezialfall der quantenmechanischen Beschreibung (die Ortsdarstellung) ist.
Diese Gleichung gilt es nun zu lösen. Wir tun dies in mehreren Schritten[21].

1. Zunächst führen wir wieder **dimensionslose Variable** ein. Als Energieeinheit wählen wir:

   $$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2},$$

   und die dimensionslose Energie (in Einheiten von E_0) nennen wir ϵ:

   $$\epsilon = \frac{E}{E_0}.$$

   Wir erhalten, nach Multiplikation mit $2/\hbar\omega$:

   $$-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar}x^2\psi = \epsilon\psi,$$

   was die Definition der folgenden Längeneinheit nahelegt:

   $$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,, \tag{2.80}$$

   und nennen die dimensionslose Länge (in Einheiten von x_0) u:

   $$u = \frac{x}{x_0}\,.$$

   Wir untersuchen im Folgenden die Wellenfunktion in Abhähgigkeit von u, wobei wir die Bezeichung $\psi(u)$ beibehalten. Es ergibt sich:

[21] Das Vorgehen ist typisch für die Lösung stationärer quantenmechanischer Probleme.

Die Webersche Differentialgleichung eines Teilchens im harmonischen Oszillator:

$$-\frac{d^2\psi}{du^2} + u^2\psi = \epsilon\psi \tag{2.81}$$

Wir erwarten – nach den vorigen Abschnitten – eine gebundene Bewegung. Die Randbedingungen ergeben sich aus der Forderung, dass die Wahrscheinlichkeit für ein Eindringen des Teilchens in die klassisch verbotenen Bereiche bei $x \to \pm\infty$ verschwindet, da dort das Potential unendlich groß ist. Es soll also gelten:

$$\lim_{u\to\pm\infty} \psi(u) = 0. \tag{2.82}$$

Ebenso fordern wir wieder die Normierbarkeit. Da dies wieder eine Differentialgleichung zweiter Ordnung ist, gibt es wieder zwei unabhängige Lösungen.

2. Wir untersuchen nun das **asymptotische Verhalten** für $u \to \pm\infty$. In diesem Fall wird unser ϵ vernachlässigbar klein gegen den Rest der Gleichung sein, und wir erhalten die einfachere Gleichung:

$$\psi_\infty'' - u^2\psi_\infty = 0$$

Diese Gleichung lösen wir mit dem Ansatz:

$$\psi_\infty \propto e^{\pm\frac{1}{2}u^2}.$$

Da ψ_∞ jedoch endlich sein muss, ist nur der Term mit $e^{-\frac{1}{2}u^2}$ möglich.

3. Den **Ansatz für die Gesamtlösung** führen wir nun wie folgt ein:

$$\psi(u) = e^{-\frac{1}{2}u^2} H(u),$$

wobei $H(u)$ eine zu bestimmende Funktion ist. Bevor wir diesen Ansatz in die Schrödinger-Gleichung einsetzen, berechnen wir die erforderlichen Ableitungen:

$$\begin{aligned}\psi'(u) &= -u\psi + e^{-\frac{1}{2}u^2} H'(u),\\ \psi''(u) &= u^2\psi - \psi - ue^{-\frac{1}{2}u^2} H'(u) - ue^{-\frac{1}{2}u^2} H'(u) + e^{-\frac{1}{2}u^2} H''(u).\end{aligned}$$

Setzen wir diese nun ein und kürzen gleich mit $e^{-1/2u^2}$, so erhalten wir folgende nicht durch elementare Funktionen lösbare Gleichung:

$$H''(u) - 2uH'(u) + (\epsilon - 1)H(u) = 0. \tag{2.83}$$

4. Ein möglicher Ansatz für die Funktion $H(u)$ ist nun eine Potenzreihe:

$$H(u) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n u^n\,, \tag{2.84}$$

und es git nun, die Koeffizienten zu bestimmen. Wir berechnen dazu wieder zunächst die Ableitungen und führen bei der zweiten Ableitung eine Indexverschiebung durch (Ziel ist

es, identische Summen in allen Termen zu erhalten):

$$H'(u) = \sum_{n=0}^{\infty} n a_n u^{n-1},$$
$$2uH'(u) = \sum_{n=0}^{\infty} 2n a_n u^n,$$
$$H''(u) = \sum_{m=0}^{\infty} m(m-1) a_m u^{m-2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2) a_{n+2} u^n,$$

wobei die Summanden $m = 0$ und $m = 1$ keinen Beitrag liefern, so dass im letzten Schritt eine Indexverschiebung, $m \to n+2$, vorgenommen wurde. Setzen wir dies in die Differentialgleichung ein, so erhalten wir:

$$\sum_{n=0}^{\infty} u^n \left[(n+1)(n+2)a_{n+2} - 2n a_n + (\epsilon - 1) a_n\right] = 0.$$

Dies muss nun für alle n seperat erfüllt sein, da die Beiträge unterschiedlicher Potentzen voneinander unabhängig sind. Es muss also der Ausdruck in der eckigen Klammer für alle n separat verschwinden. Umgeformt ergibt uns diese Bedingung eine Rekurrenzformel:

$$a_{n+2} = a_n \frac{2n+1-\epsilon}{(n+2)(n+1)}\,. \tag{2.85}$$

Wir haben also 2 freie Koeffizienten. Die Vorgabe von a_0 bestimmt alle geraden n. Diese Funktionen nennen wir $H_+(u)$. Die Vorgabe von a_1 bestimmt alle ungeraden n. Diese Funktionen nennen wir $H_-(u)$.

5. Wir testen nun, ob das oben besprochene asymptotische Verhalten durch den Ansatz (2.84) gewährleistet wird. Wir besprechen dies für $H_+(u)$ (die Rechnung erfolgt analog für die ungeraden Funktionen).

$$H_+(u) = \sum_{n=0}^{\infty} a_{2n} u^{2n}.$$

Für große n gilt

$$\frac{a_{2n+2}}{a_{2n}} \to \frac{1}{n} \tag{2.86}$$

Ebenso gilt für große n:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_{2n} u^{2n} = a_{2n} u^{2n} \left[1 + \frac{u^2}{n} + \frac{u^4}{n(n+1)} + ...\right]$$

Dies ist aber genau[22] die Taylorentwicklung von e^{u^2}. Nun würde $\psi_+(u) \propto e^{u^2} \cdot e^{-\frac{u^2}{2}}$ aber für große $|u|$ divergieren. Analog würden auch die ungeraden Funktionen divergieren. Damit is klar, dass der Ansatz (2.84) nicht korrekt ist.

[22]Streng genommen, ergibt sich die e-Funktion für $n = 2$, für die Relation (2.86) noch nicht erfüllt ist. Der Fehler der Terme niedriger Ordnung zur Summe ist aber vernachlässigbar.

6. Ein möglicher Ausweg ist nun die Forderung, dass die Reihe bei einem endlichen Index abbrechen muss:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \to \sum_{n=0}^{k}$$

Dies führt dann auf Polynome, deren asymptotisches Verhalten immer schwächer ist als das der e-Funktion. Die Polynome haben dann offensichtlich die Eigenschaft, dass ein $a_n \neq 0$ existiert mit $a_l = 0$ für alle $l > n$. Betrachten wir nun die Rekurrenzformel (2.85) und setzen a_n als eben diesen letzten Koeffizienten ungleich 0. Dann gilt $a_{n+2} = 0$:

$$\frac{2n+1-\epsilon}{(n+2)(n+1)} a_n \equiv 0\,,$$
$$\epsilon_n = 2n+1\,.$$

Im letzten Schritt haben wir die dimensionslose Energie ϵ mit einem Index versehen, da es ja eine Serie von Lösungen gibt, je nachdem, bei welcher Ordnung die Reihe abgebrochen wird. Damit wird klar, dass wir Lösungen der Schrödingergleichung gefunden haben, die nur zu diskreten Energien korrespondieren.

Setzen wir nun wieder die Definition von ϵ ein, so erhalten wir die diskreten Energie-Eigenwerte (Bindungszustände):

$$\frac{E_n}{E_0} = 2n+1$$
$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), \quad n \in \mathbb{N}. \tag{2.87}$$

Die Energiequantisierung ist analog zum Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden. Der Unterschied besteht darin, dass hier ein äquidistantes Energiespektrum vorliegt[23]:

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega.$$

Die Gundzustandsenergie, $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$, ist wiederum endlich, was wieder mit der Unschärferelation zusammenhängt.

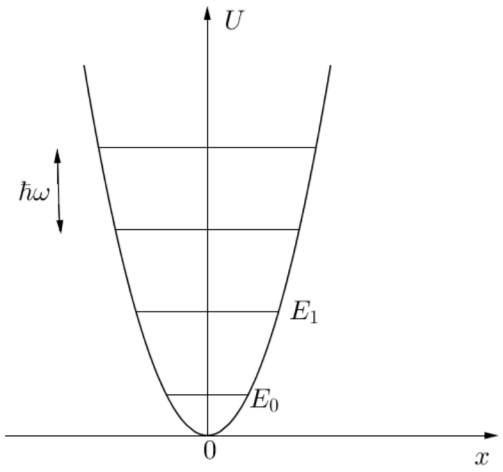


Abbildung 2.33: Äquidistante Energieniveaus im harmonischen Oszillatorpotential.

[23]Der Grund ist, dass hier das Potential wesentlich langsamer anwächst.

Wir schlussfolgern, dass die Lösung durch einen Potenzreihen-Ansatz und den Abbruch der Reihe erfolgreich war[24].

Kommen wir nun zu den Eigenfunktionen $\psi_n(u)$. Es gilt mit unserem Ansatz:

$$\psi_n(u) = C_n e^{-\frac{u^2}{2}} H_n(u). \tag{2.88}$$

Hierbei sind für gerade n die Polynome:

$$H_{+_n}(u) = a_0^{(n)} + a_2^{(n)} u^2 + ... + a_n^{(n)} u^n,$$

und für n ungerade:

$$H_{-_n}(u) = a_1^{(n)} u + a_3^{(n)} u^3 + ... + a_n^{(n)} u^n.$$

Wir wählen nun willkürlich (dies ist die Standard-Konvention):

$$a_n^{(n)} = 2^n \,.$$

Um die Koeffizienten niedrigerer Ordnung, $m < n$, aus $a_n^{(n)}$ zu berechnen, schreiben wir die Rekurrenzformel (2.85) noch einmal um, wobei wir den Index der Koeffizienten jetzt mit m bezeichnen, um dies von der Ordnung n des Polynoms zu unterscheiden:

$$a_{m+2}^{(n)} = a_m^{(n)} \frac{2m + 1 - \epsilon_n}{(m+2)(m+1)} \,, \quad m + 2 \leq n \,. \tag{2.89}$$

Um hiermit etwas vertraut zu werden, rechnen wir hier die ersten Polynome aus:

$$\begin{aligned} H_0(u) &= 2^0 \cdot u^0 = 1, \\ H_1(u) &= 2^1 \cdot u^1 = 2u, \\ H_2(u) &= a_0^{(2)} + a_2^{(2)} u^2. \end{aligned}$$

In der letzten Zeile müssen wir aus $\epsilon_2 = 2 \cdot 2 + 1 = 5$ und $a_2^{(2)} = 2^2$ den ersten Koeffizienten bestimmen. Aus Formel (2.89) ergibt sich mit $m = 0$ (!)

$$\begin{aligned} a_2^{(2)} = 4 &= a_0^{(2)} \frac{2 \cdot 0 + 1 - 5}{(0+2)(0+1)} \,, \\ a_0^{(2)} &= -2 \,. \end{aligned}$$

Also ist das Polynom gegeben durch

$$H_2(u) = -2 + 4u^2 \,.$$

Die folgenden Polynome geben wir ohne Rechnung an:

$$\begin{aligned} H_3(u) &= 8u^3 - 12u, \\ H_4(u) &= 16u^4 - 48u^2 + 12, \\ H_5(u) &= 32u^5 - 160u^3 + 120u. \end{aligned}$$

Aufgabe: Man berechne die Polynmone $H_3(u), H_4(u)$ und $H_5(u)$, unter Verwendung der Rekurrenzformel (2.89).

[24]Dieses Konzept geht auf Arnold Sommerfeld zurück (Sommerfeldsche Polynom-Methode) und ist auch für andere quantenmechanische Probleme, wie etwa das Wasserstoff-Problem, erfolgreich.

2.9.3 Hermite–Polynome

Die oben gefundenen Polynome H nennt man auch Hermite-Polynome[25]. Wir geben die wichtigsten Eigenschaften an.

a.) Die Polynome besitzen folgende Darstellung:

$$H_n(u) = (-1)^n \, e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2} = 2^n u^n + ... \tag{2.90}$$

b.) Daraus folgt sofort

$$\frac{d^n}{du^n} H_n = 2^n n! \tag{2.91}$$

c.) Wir geben nun ohne Ableitung noch zwei weitere Eigenschaften von H_n an:

$$H_n'(u) = 2nH_{n-1}(u), \tag{2.92}$$

d.) sowie

$$uH_n(u) = nH_{n-1}(u) + \frac{1}{2} H_{n+1}(u) \tag{2.93}$$

Diese Eigenschaften werden wir im Folgenden noch benutzen.

2.9.4 Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators

Wir wollen nun die Eigenfunktionen $\psi_n(u)$ skizzieren. Hierfür halten wir noch fest, dass $H_n(u)$ genau n reelle Nullstellen besitzt. Mit der Gauss-Funktion der Gesamtlösung, welche keine Nullstellen besitzt, haben wir also wieder dieselbe Anzahl an Knotenpunkte wie beim Teilchen im Kastenpotential. Berechnen wir nun die Eigenfunktionen. Der Grundzustand ergibt sich, mit $H_0(u) = 1$, zu:

$$\psi_0(u) = C_0 e^{-\frac{u^2}{2}},$$

und die zugehörige Grundzustandsenergie beträgt $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$. Zum ersten angeregten Zustand gehört das Hermite-Polynom $H_1(u) = 2u$. Also ist

$$\psi_1(u) = C_1 \cdot 2u \cdot e^{-\frac{u^2}{2}},$$

die Wellenfunktion für diesen Zustand mit der Energie $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$. Diese Wellenfunktion hat eine Nullstelle bei $u = 0$ und weist Extrempunkte bei $u_E = \pm 1$ auf. Nun betrachten wir noch $\psi_2(u)$:

$$\psi_2(u) = C_2(4u^2 - 2)e^{-\frac{u^2}{2}},$$

welche zur Energie $E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ korrespondiert. Diese Funktion hat zwei Nullstellen, $u_E = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}$ und drei Extrema bei $u = 0$ sowie $u = \pm\sqrt{\frac{5}{2}}$. Diese Funktionen sind in Abbildung 2.34 dargestellt. Hier erkennt man bereits den Trend, dass mit wachsendem n die äußeren Maxima der Wellenfunktion immer weiter nach außen wandern. Wir werden etwas später (vgl. Abschnitt

[25] eingeführt vom französischen Mathematiker Charles Hermite (1822-1901)

2.9.5) sehen, dass dieser Trend mit großen n zum klassischen Grenzfall führt, bei dem die Wahrscheinlichkeitsdichte nah an den klassischen Umkehrpunkten gepeakt ist.

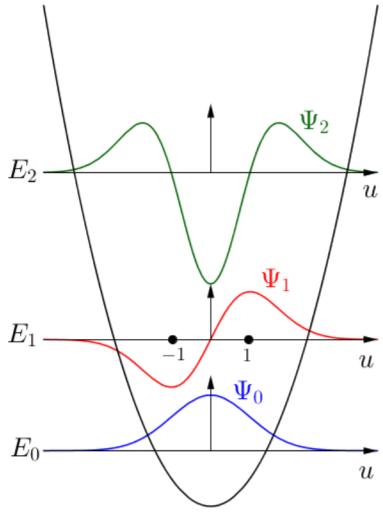


Abbildung 2.34: Die ersten drei Eigenzustände des eindimensionalen linearen harmonischen Oszillators.

Wir vergleichen nun noch den klassischen harmonischen Oszillator mit dem quantenmechanischen Oszillator. Im klassischen Fall ist die kleinste möglich Energie $E_{min} = 0$, und es sind beliebige kontinuierliche positive Energiewerte möglich. In der Quantenmechanik existiert dagegen ein endliches Minimum (der Grundzustand), $E_{min} = \frac{\hbar\omega}{2}$, und die möglichen Energie-Eigenwerte sind diskrete äquidistante Werte. In der Klassik kann ein Teilchen niemals in die Bereiche außerhalb des Potentials eindringen. In der Quantenmechanik stellen wir dagegen ein Eindringen von $\psi(x)$ in diese Bereiche fest. In diesen Bereichen gibt es dann einen exponentiellen Abfall der Wahrscheinlichkeitsamplitude mit wachsendem $|x|$ bzw. $|u|$.

Normierung der Wellenfunktionen: Um die vollständige Lösung anzugeben, benötigen wir noch die Werte der Konstanten C_n. Wie üblich berechnen wir diese über die Normierungsbedingung. Hierbei muss die Wahrscheinlichkeitsdichte, ρ_n, eines Zustandes n in $[-\infty, \infty]$ auf 1 normiert sein. Um dies zu berechnen, ersetzen wir wieder unser u durch x, indem wir uns an

$$u = \frac{x}{x_0}, \qquad \text{mit } x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

erinnern. Aus Glg. (2.88) wird dann:

$$\psi_n(x) = C_n e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right)$$

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx \\ &= C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) dx \end{aligned}$$

Wir substituieren nun wieder

$$\begin{aligned} u &= \frac{x}{x_0} \\ \frac{du}{dx} &= \frac{1}{x_0} \\ dx &= x_0 du \end{aligned}$$

und erhalten:

$$1 = C_n^2 x_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} H_n(u) H_n(u) du$$

Die Rückersetzung zuvor mussten wir durchführen, um bei der Substitution den Faktor x_0 nicht zu vergessen. Wir benutzen nun Glg. (2.90) und erhalten:

$$\begin{aligned} 1 &= (-1)^n x_0 C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} e^{u^2} H_n(u) \cdot \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2} du \\ &= (-1)^n x_0 C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n(u) \cdot \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2} du \end{aligned}$$

Im Folgenden führen wir eine n-fache partielle Integration durch. Hierbei wechselt bei jeder erneuten partiellen Integration das Vorzeichen vor dem entstehenden Integral. Wir erhalten also einen weiteren Faktor $(-1)^n$. Die partielle Integration wählen wir so, dass wir immer den Exponentialteil integrieren, damit bei jedem Schritt eine Ableitung wegfällt. Man erhält:

$$\begin{aligned} 1 &= \underbrace{(-1)^{2n}}_{=1} x_0 C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n H_n(u)}{du^n} \cdot e^{-u^2} du \\ 1 &= x_0 C_n^2 2^n \cdot n! \cdot \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du}_{\sqrt{\pi}} \\ &= x_0 C_n^2 2^n n! \sqrt{\pi}, \end{aligned}$$

wobei wir Eigenschaft (2.91) der Hermite-Polynome benutzt haben. Man erhält den Vorfakter der n-ten Wellenfunktion also zu:

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{x_0 \sqrt{\pi} n! 2^n}}. \tag{2.94}$$

Bei der mehrfachen partiellen Integration haben wir den ersten Term jeder partiellen Integration unter den Tisch fallen lassen. Dass dieser tatsächlich immer Null wird, zeigen wir jetzt am Beispiel des ersten Terms:

$$\left[\frac{d^{n-1}}{du^{n-1}} \left(e^{-u^2} \right) H_n(u) \right]_{-\infty}^{\infty} = \left[H_{n-1}(u) H_n(u) \frac{1}{e^{u^2} (-1)^n} \right]_{-\infty}^{\infty},$$

wobei wir wieder Glg. (2.90) benutzt haben. Der Abfall der Exponente an den Grenzen sorgt dafür, dass dieser Term an beiden Rändern verschwindet.

Orthogonalität: Im Folgenden wollen wir einige Eigenschaften der Eigenfunktionen ψ_n besprechen. Zunächst ist zu sagen, dass die Eigenfunktionen bezüglich des Skalarproduktes

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_n^*(x)\psi_m(x),$$

ein Orthonormalsystem bilden. Es gilt also für n und m:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_m(x)dx = \delta_{n.m}. \tag{2.95}$$

Diese Eigenschaft ist eine Konsequenz der Orthogonalität von Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten eines hermiteschen Operators, die wir in Abschnitt 3.3 beweisen werden (Satz 5). Das Verschwinden des Integrals für $n \neq m$ können wir aber auch durch direkte Rechnung prüfen. Dazu verwendet man wieder mehrfache partielle Integration, völlig analog zur Normierung[26]. Darüber hinaus bildet die Gesamtheit der $\{\psi_n(x)\}$ ein vollständiges Funktionensystem. Das heißt, dass man jede Funktion φ als Linearkombination der Oszillator-Eigenfunktionen schreiben kann:

$$\varphi(x) = \sum_{l=0}^{\infty} D_l\, \psi_l(x), \qquad D_l \in \mathcal{C}\,.$$

Wir fassen unsere Ergebnisse zusammen:

Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi} x_0}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \tag{2.96}$$

Hierbei ist x_0 die Ausdehnung der Grundzustandsfunktion:

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{2.97}$$

Die Energien sind für $n \in \mathbb{N}$ äquidistant gemäß

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{2.98}$$

verteilt. Die Ortswahrscheinlichkeits-Dichte ist gegeben durch:

$$\rho_n(x) = |\psi_n(x)|^2 = \frac{e^{-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}}{2^n n! \sqrt{\pi} x_0} H_n^2\left(\frac{x}{x_0}\right), \qquad \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \rho_n(x) = 1 \tag{2.99}$$

und ist für alle n auf 1 normiert.

[26]Dabei wendet man zweckmäßigerweise die Ableitung zunächst für die Funktion Ψ_n an, mit $n > m$, so dass die n-fache partielle Integration auf eine n-fache Differentatation von H_m führt, was Null ergibt.