

Vorlesungen über Quantenmechanik - Vorlesung 10

JOCHEN GEPPERT / DIDAKTIK DER PHYSIK

Wintersemester

ABSTRACT. Behandelt werden in dieser ersten Vorlesung zum harmonischen Oszillator der klassische harmonische Oszillator sowie als mathematische Vorbereitung auf die quantenmechanische Behandlung die HERMITE-Polynome.

1. DER KLASSISCHE EINDIMENSIONALE HARMONISCHE OZILLATOR

Maple-Programme zur Vorlesung:

- QMVor10Pr1.mws (Klassischer harmonischer Oszillator)
- QMVor10Pr2.mws (HERMITE-Polynome)

Ein Massenpunkt sei an einer Feder befestigt und sei in der Lage sich entlang der x-Achse zu bewegen. Eine Schraubenfeder mit der Federkonstante k bewirkt die ortsabhängige Federkraft:

$$\mathbf{F} = -k \cdot \mathbf{x} \quad (1)$$

Dieser Kraft entspricht ein Potenzial:

$$V_{\text{Os}} = \frac{1}{2}k \cdot x^2 = E_{\text{pot}} \quad (2)$$

Aus dem ersten NEWTON-Gesetz:

$$\mathbf{F} = m \cdot \ddot{\mathbf{x}} \quad (3)$$

erhält man die *Bewegungsgleichung des klassischen harmonischen Oszillators*:

$$m \cdot \ddot{\mathbf{x}} = -k \cdot \mathbf{x} \quad (4)$$

Wir betrachten die gesamte Bewegung nur in der x-Richtung, also eindimensional:

$$m \cdot \frac{d^2x}{dt^2} = -k \cdot x \quad (5)$$

Diese Differenzialgleichung wird im ersten Programm mit Maple gelöst. Wir erhalten dann die folgende vollständige Lösung¹:

$$x(t) = x(0) \cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right) + \frac{v(0) \sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right)}{\sqrt{\frac{k}{m}}} \quad (6)$$

Dabei ist $x(0)$ der Anfangsort der Bewegung und $v(0)$ die Geschwindigkeit zu Beginn der Bewegung. Aus einer Betrachtung kann man erkennen, dass der Radikand der

¹Siehe Programm QMV10Pr1.mws.

Wurzel die Einheit $\frac{1}{s^2}$ hat und aus diesem Grund definiert man die *Kreisfrequenz* ω über:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (7)$$

und hieraus die *Frequenz der Schwingung*:

$$f = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (8)$$

1.1. Die reibungsfreie Schwingung eines Massenpunktes. Wir betrachten im Folgenden das mathematische Modell eines Massenpunktes, der reibungsfrei um den Ursprung des Koordinatensystems an einer masselosen Feder schwingt:

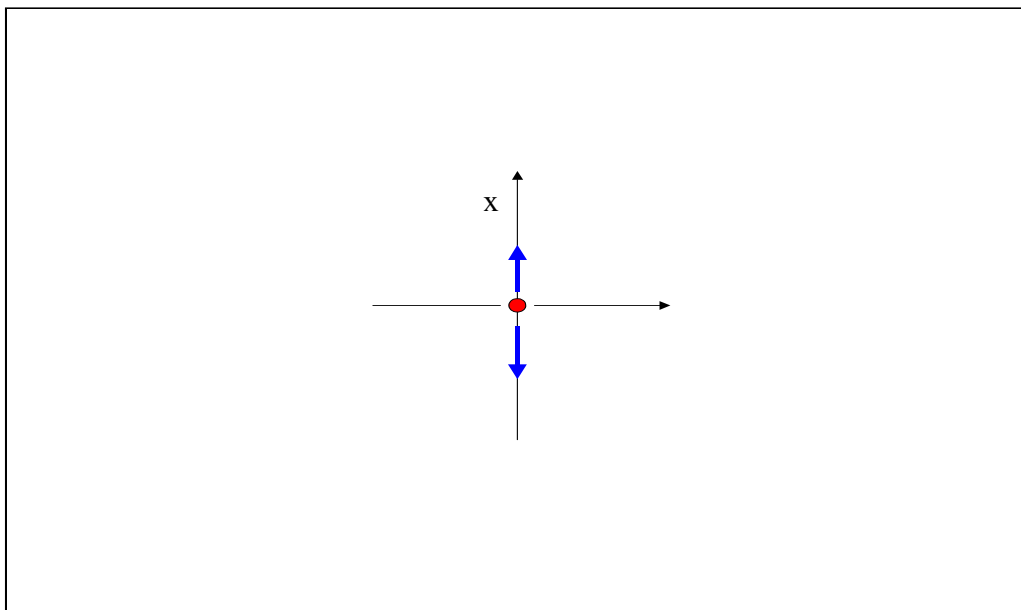


Figure 1: Reibungsfrei schwingender Massenpunkt

Im ersten Programm ist eine Animation der Schwingung zu sehen.

Bemerkung: *Zur Vernachlässigung der Gravitation*

Natürlich kann man nicht einfach die Gravitation in dieser Bewegung vernachlässigen. Es müsste eigentlich eine Bewegungsgleichung in der Art:

$$m \cdot \frac{d^2 \tilde{x}}{dt^2} = -k \cdot \tilde{x} - m \cdot g \quad (9)$$

gelöst werden. Betrachtet man aber den Ruhepunkt der Feder², d.h. den Punkt, an dem sich Federkraft und Gewichtskraft aufheben:

$$m \cdot \frac{d^2 \tilde{x}}{dt^2} = 0 \quad (10)$$

²Man kann sich vorstellen, dass die Feder eine bestimmte Zeit hängt.

$$\begin{aligned} -k \cdot \tilde{x} - m \cdot g &= 0 \\ \tilde{x} &= -\frac{mg}{k} \end{aligned}$$

so kann man diesen Ort als Nullpunkt des Koordinatensystems wählen und erhält somit doch wieder die obige Bewegungsgleichung (4).

Beispiel:

$$x_0 = -3, \quad k = 2, \quad m = 1, \quad v_0 = 0 \quad (11)$$

Nun wird die Feder aus der Ruhelage ausgelenkt und der Massenpunkt anschließend losgelassen. Man erhält die folgende Ortskurve des Teilchens:

$$x(t) = -3 \cos(\sqrt{2}t)$$

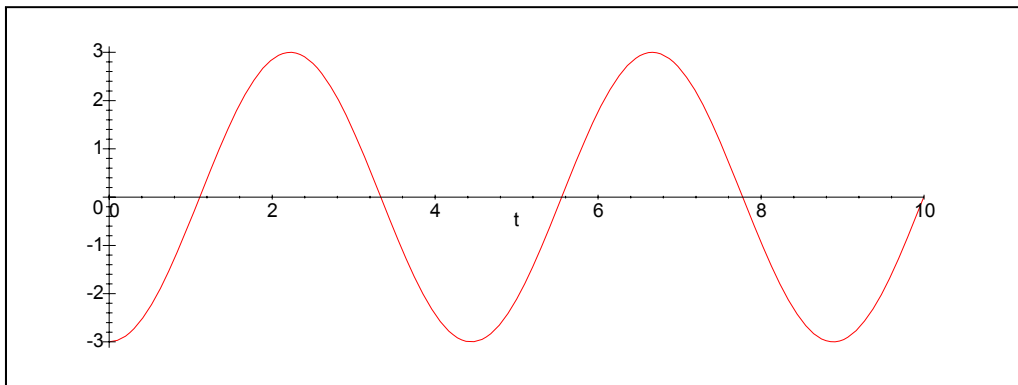


Figure 2: Ortskurve des Teilchens

Zu Beginn der Bewegung ($t = 0$) ist die gesamte Energie der Bewegung in der Feder als potenzielle Energie gespeichert:

$$\mathbf{E}_{\text{pot}}(0) = \frac{1}{2} k x_0^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x_0^2 \quad (12)$$

Je größer also der Betrag der Auslenkung der Feder ist, umso größer ist auch die *Amplitude* (= Maximum der Auslenkung) der Bewegung. Man kann also aus der Anfangsenergie die Amplitude der Schwingung berechnen:

$$A = x_0 = \sqrt{\frac{2\mathbf{E}_{\text{pot}}(0)}{m\omega^2}} \quad (13)$$

Die Dauer einer Vollschiwingung bezeichnet man als *Schwingungsdauer* T . Sie berechnet sich aus dem Kehrwert der Frequenz:

$$T = \frac{1}{f} = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi \cdot \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (14)$$

Betrachten wir nun die *Geschwindigkeitskurve des Teilchens*:

$$v(t) = 3\sqrt{2} \sin \sqrt{2}t$$

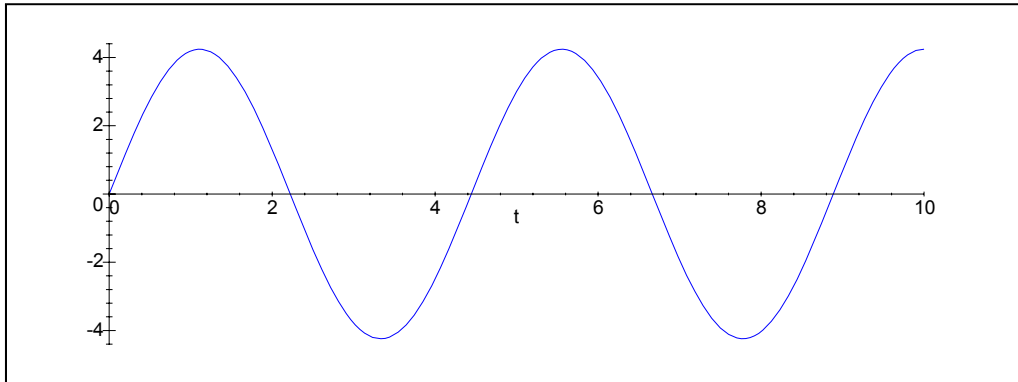


Figure 3: Geschwindigkeitskurve des Teilchens

und die *Beschleunigungskurve*:

$$a(t) = 6 \cos(\sqrt{2}t)$$

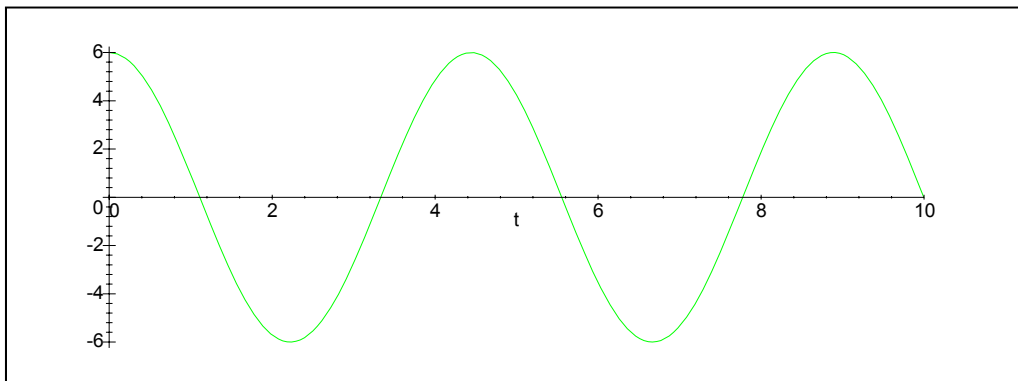


Figure 4: Beschleunigungskurve des Teilchens

Betrachten wir zum Verständnis der Bewegung die Kurven in einem gemeinsamen Diagramm:

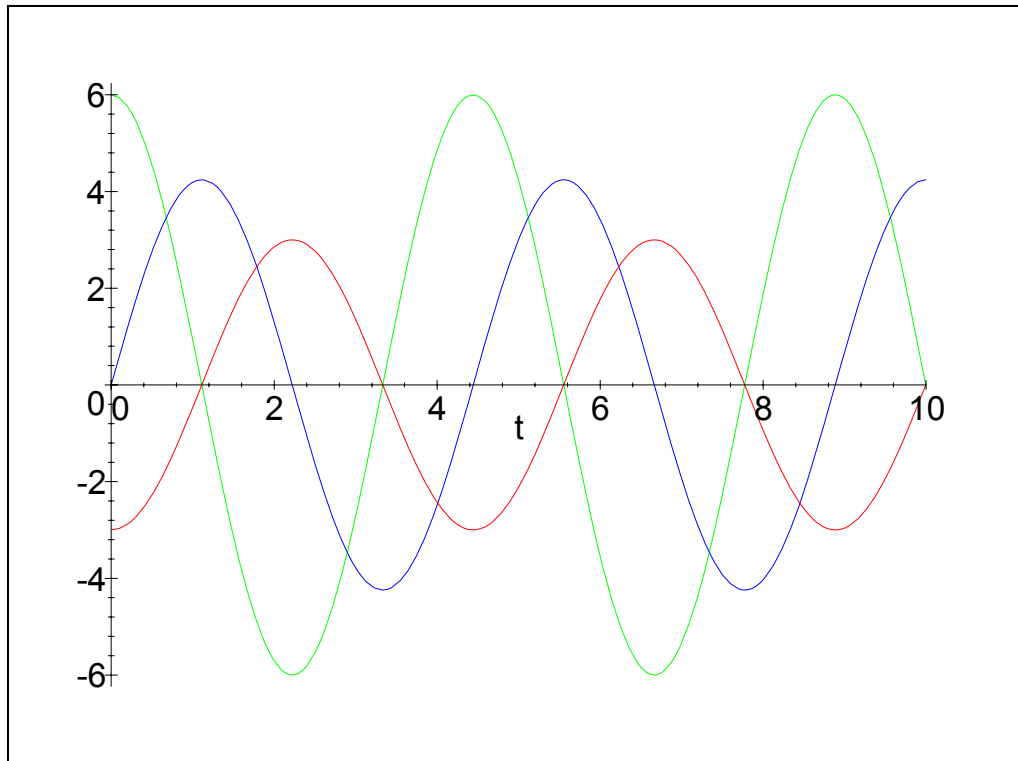


Figure 5: Ortskurve sowie Geschwindigkeits- und Beschleunigungskurve des Teilchens

Man kann nun folgendes erkennen:

Die Beschleunigung (grüne Kurve) ist die Änderung der Geschwindigkeit. Sie ist zu Beginn der Bewegung maximal, da sich dort die Geschwindigkeit von Null auf den Wert $v(\varepsilon)$, $\varepsilon \sim 0$ ändert. Die Geschwindigkeit des Massenpunkts nimmt nun immer mehr zu, während sie sich immer weniger ändert. Im Nullpunkt der Bewegung ist die Geschwindigkeit maximal und die Beschleunigung minimal. Anschließend kehrt sich die Bewegung um. Die Geschwindigkeit nimmt immer schneller ab - die Beschleunigung wird also immer größer - bis die Geschwindigkeit am Umkehrpunkt Null ist. Die Gesamtenergie des Teilchens teilt sich in einen Anteil der potenziellen und in einen Anteil der kinetischen Energie auf:

$$E = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}mv^2 \quad (15)$$

Die Energie E des reibungsfrei schwingenden Teilchens bleibt erhalten, ihre beide Anteile werden während der Bewegung ständig ineinander umgewandelt.

Betrachten wir ein dazugehöriges **Energiediagramm** für unser gewähltes Beispiel:

$$E = 9 \cos^2(\sqrt{2}t) + 9 \sin^2(\sqrt{2}t) = 9$$

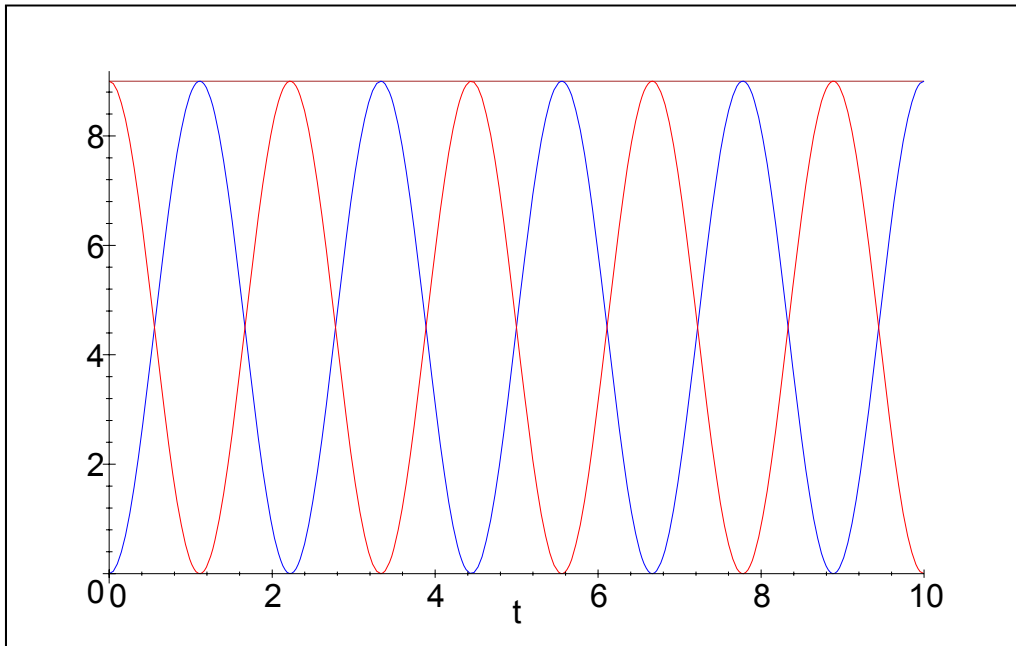


Figure 6: Energiediagramm der reibungsfreien Schwingung

Im Nulldurchgang ist die kinetische Energie maximal und die potenzielle Energie verschwindet, während es im Umkehrpunkt der Bewegung genau umgekehrt ist. Die Gesamtenergie ist erhalten, schließlich wird die Bewegung im konservativen Kraftfeld der Erde betrachtet.

1.2. Die klassische Wahrscheinlichkeitsdichte. Der Massenpunkt bewegt sich während der ganzen Schwingung im Ortsbereich zwischen:

$$-x_0 \dots x_0$$

hin und her. Dabei bewegt sich der Massenpunkt in der infinitesimal kleinen Zeit dt um das infinitesimal kleine Wegstück dx , von x nach $x + dx$. Eine ganze Schwingung (von $-x_0$ über x_0 wieder nach $-x_0$) dauert die Zeitspanne T . Es gilt also:

$$\int_0^T \frac{dt}{T} = 1 \quad (16)$$

Also kann man $dP := \frac{dt}{T}$ als Wahrscheinlichkeit dafür auffassen, dass sich das Teilchen im Intervall $[x, x + dx]$ aufhält. Dann gilt für die *klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte*:

$$\frac{dP}{dx} = \frac{dt}{dx} \cdot \frac{1}{T} = \frac{1}{2\pi} \cdot \sqrt{\frac{k}{m}} \cdot \frac{dt}{dx} \quad (17)$$

Für das betrachtete Beispiel gilt dann:

$$x(t) = -3m \cdot \cos\left(\sqrt{2}\frac{1}{s}t\right) \Leftrightarrow t(x) = \frac{1}{\sqrt{2}\frac{1}{s}} \arccos\left(-\frac{1}{3m}x\right) \quad (18)$$

$$\frac{dt}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2}\frac{1}{s}} \left(\frac{-1}{3m}\right) \cdot \frac{-1}{\sqrt{1 - \left(\frac{1}{3m}x\right)^2}} \quad (19)$$

Wenn man beachtet, dass

$$\frac{d}{dx} \arccos(x) = \frac{-1}{\sqrt{1 - x^2}} \quad (20)$$

gilt, so folgt:

$$\frac{dP}{dx} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{3\sqrt{2} \cdot \sqrt{1 - \left(\frac{1}{3m}x\right)^2}} \cdot \sqrt{\frac{2}{1}} \frac{1}{m} \quad (21)$$

Es muss gelten:

$$2 \cdot \left| \int_{-x_0}^{x_0} \frac{dP}{dx} dx \right| = 1 \quad (22)$$

also:

$$2 \cdot \left| \int_{-3}^3 \frac{1}{2\pi} \frac{1}{3\sqrt{2} \cdot \sqrt{1 - \left(\frac{1}{3}x\right)^2}} \cdot \sqrt{\frac{2}{1}} dx \right| = 1 \quad (23)$$

wie man mit Maple leicht berechnen kann.

Das folgende Diagramm zeigt die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte:

$$\frac{dP}{dx} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{3\sqrt{2} \cdot \sqrt{1 - \left(\frac{1}{3m}x\right)^2}} \cdot \sqrt{\frac{2}{1}} \frac{1}{m}$$

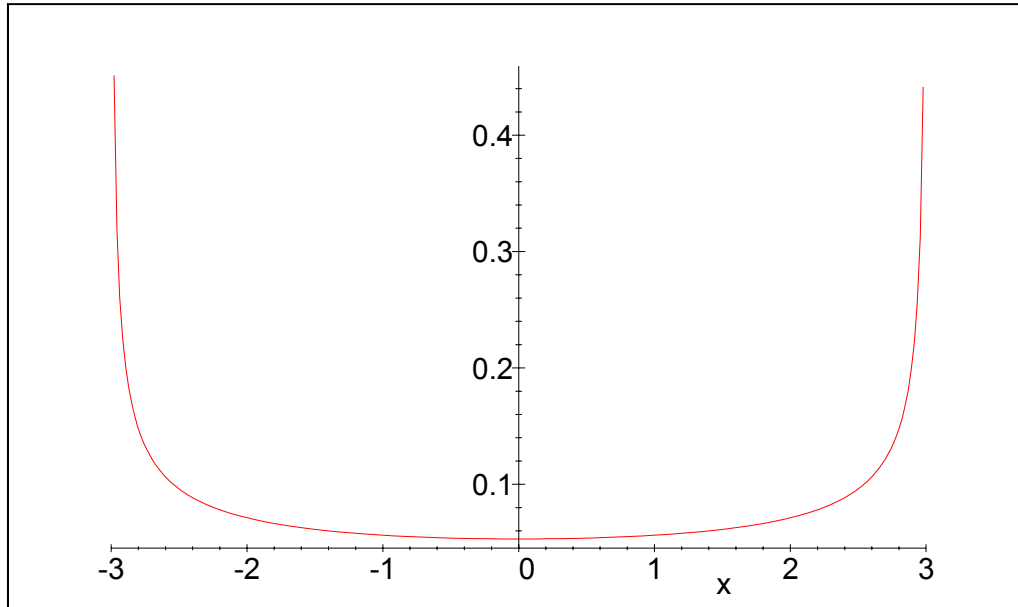


Figure 7: Klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte: die Einteilung der x-Achse ist m, die der y-Achse ist $1/m$.

Man kann sehr deutlich erkennen, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte an den Umkehrpunkten sehr stark zunimmt. Mit anderen Worten dies bedeutet, dass die Aufenthaltsdauer an den Umkehrpunkten³ länger ist, als an allen anderen Orten! Das ist auch nicht weiter verwunderlich, denn dort geht ein Abbremsvorgang in einen Beschleunigungsvorgang über.

³Bzw. in einem winzigen Intervall, das den Umkehrpunkt enthält.

2. MATHEMATISCHER EINSCHUB: DIE HERMITE-POLYNOME

In den folgenden Vorlesungen soll der quantenmechanische harmonische Oszillator behandelt werden. Im Rahmen der Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung für den harmonischen Oszillator werden auf die HERMITE-Polynome stoßen. Sie sollen deshalb an dieser Stelle eingeführt werden. Der mathematische Schwierigkeitsgrad bewegt sich auf dem Niveau eines Leistungskurses in Mathematik und sollte deshalb keine größeren Probleme bereiten.

2.1. Einführung: Die GAUSS-Glockenkurve. Die Glockenkurve ist uns schon hinlänglich bekannt und sie spielt auch in der Erörterung der HERMITE-Polynome die Ausgangsrolle:

$$f(z) = e^{-z^2} \quad (24)$$

Im Programm "QMVorl10Pr2.mws" werden in einer Schleife die ersten fünf Ortsableitungen gebildet. Dabei erhält man:

$$\begin{aligned} f_1(z) &= e^{-z^2} (-2z) \\ f_2(z) &= e^{-z^2} (-2 + 4z^2) \\ f_3(z) &= e^{-z^2} (12z - 8z^3) \\ f_4(z) &= e^{-z^2} (12 - 48z^2 + 16z^4) \\ f_5(z) &= e^{-z^2} (-120z + 160z^3 - 32z^5) \end{aligned} \quad (25)$$

Man kann schon hier eine allgemeine Struktur der folgenden Art erkennen (die sich auch mathematisch beweisen lässt):

**n-Ableitung der GAUSS-Funktion ist gleich einem
einem Polynom n-ten Grades multipliziert mit dem
Faktor e^{-z^2} .**

Also in kompakter mathematischer Schreibweise:

$$f^{(n)}(z) = \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} = P_n(z) \cdot e^{-z^2} \quad (26)$$

wobei eben $P_n(z)$ ein Polynom n-ten Grades darstellt. n ist hierbei, wie im folgenden, eine beliebige natürliche Zahl.

2.2. Definition der HERMITE-Polynome. Aus diesen Polynomen $P_n(z)$, die wir soeben bei der Ableitung der GAUSS-Glockenkurve gefunden haben, werden nun durch Ausklammern von $(-1)^n$ die **HERMITE-Polynome** definieren:

$$H_n(z) = (-1)^n \cdot P_n(z) \quad (27)$$

Mit anderen Worten also:

$$H_n(z) = (-1)^n \cdot e^{z^2} \cdot \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} \quad (28)$$

Man erhält auf diese Weise:

$$\begin{aligned}
 H_1(z) &= 2z \\
 H_2(z) &= -2 + 4z^2 \\
 H_3(z) &= -12z + 8z^3 \\
 H_4(z) &= 12 - 48z^2 + 16z^4 \\
 H_5(z) &= 120z - 160z^3 + 32z^5
 \end{aligned} \tag{29}$$

und es ist erstens kein Problem mit Maple auf diese Art und Weise über eine Schleife diese Polynome zu erzeugen, zum zweiten verfügt Maple in der Bibliothek "orthopoly" über :

$$H(n, z) = H_n(z) \tag{30}$$

einen automatischen Befehl zur Erzeugung von HERMITE-Polynomen.

Man kann ganz allgemein zeigen, dass $H_n(z)$ genau n reelle Nullstellen besitzt. Auch über ihre Lage lässt sich eine Aussage machen: zwischen zwei Nullstellen von $H_{n-1}(z)$ liegt eine Nullstelle von $H_n(z)$, wobei diese Aussage erst für $n \geq 3$ gilt. Im Folgenden wird dieser Sachverhalt graphisch für den Fall $n - 1 = 4$ betrachtet. Im Programm werden die Nullstellen der ersten fünf HERMITE-Polynome numerisch bestimmt und man kann so den Sachverhalt überprüfen.

Betrachten wir also die Graphik:

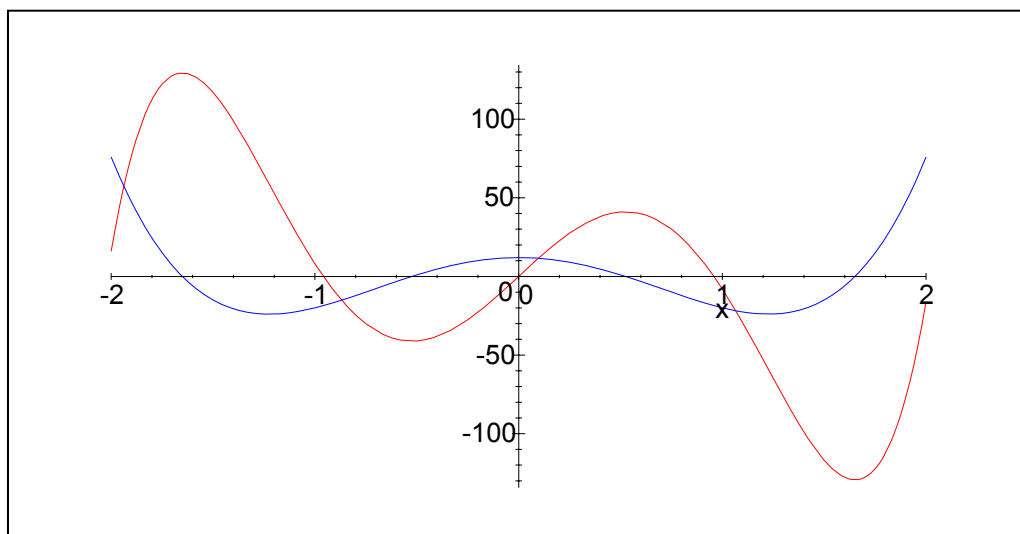


Figure 8: 4. und 5. HERMITE-Polynom

Man kann erkennen, dass zwischen zwei Nullstellen des blau gezeichneten Polynoms $H_4(z)$ immer eine Nullstelle von $H_5(z)$ liegt.

Die HERMITE-Polynome erfüllen alle eine Differenzialgleichung bei deren Lösung man auch auf diese Polynome gestoßen ist, ihre Herleitung ist mathematisch etwas anspruchsvoller und wird im nächsten Kapitel vorgeführt. Es reicht aber aus, die

Differenzialgleichung, die sogenannte **HERMITE-Differenzialgleichung** an dieser Stelle zur Kenntnis zu nehmen. Sie lautet:

$$\frac{d^2}{dz^2} H_n(z) - 2z \cdot \frac{d}{dz} H_n(z) + 2n \cdot H_n(z) = 0 \quad (31)$$

Im dazu passenden Maple-Programm wird diese Gleichung für die ersten fünf Polynome überprüft, und man kann die Richtigkeit erkennen.

Im Zusammenhang mit der Behandlung des eindimensionalen harmonischen Oszillators in der Quantenmechanik tauchen die HERMITE-Polynome wieder auf, allerdings in einer etwas anderen Gestalt. Es wird nämlich dort das Argument z durch $\frac{x}{a}$ ersetzt. Dann gilt:

$$z = \frac{x}{b} \Rightarrow \frac{dz}{dx} = \frac{1}{b} \Leftrightarrow dz = \frac{dx}{b} \Rightarrow \frac{d}{dz} = b \cdot \frac{d}{dx}$$

Entsprechend natürlich für die n -te Ableitung:

$$\frac{d^n}{dz^n} = b^n \cdot \frac{d^n}{dx^n} \quad (32)$$

Damit haben die HERMITE-Polynome nun die Gestalt:

$$H_n\left(\frac{x}{b}\right) = (-1)^n e^{\left(\frac{x}{b}\right)^2} b^n \frac{d^n}{dx^n} e^{-\left(\frac{x}{b}\right)^2} \quad (33)$$

Die HERMITE-Differenzialgleichung hat dann natürlich die folgende Gestalt:

$$b^2 \frac{d^2}{dx^2} H_n\left(\frac{x}{b}\right) - 2 \frac{x}{b} \frac{d}{dx} H_n\left(\frac{x}{b}\right) + 2n \cdot H_n\left(\frac{x}{b}\right) = 0$$

nach Division durch b^2 :

$$\frac{d^2}{dx^2} H_n\left(\frac{x}{b}\right) - 2 \frac{x}{b^2} \frac{d}{dx} H_n\left(\frac{x}{b}\right) + 2 \frac{n}{b^2} \cdot H_n\left(\frac{x}{b}\right) = 0 \quad (34)$$

2.3. Die Entwicklung der HERMITE-Differenzialgleichung. In diesem Kapitel wird die HERMITE-Differenzialgleichung hergeleitet und damit bewiesen, dass sie von den HERMITE-Polynomen erfüllt wird. Die Herleitung ist für das Verständnis der folgenden Skripte nicht von Bedeutung, allerdings mathematisch auch nicht übermäßig anspruchsvoll. Es wird im wesentlichen nur die TAYLOR-Formel verwendet, die schon aus der Schule bekannt ist:

$$f(z + \lambda) = f(z) + f'(z) \cdot \lambda + \frac{1}{2} f''(z) \cdot \lambda^2 + \frac{1}{3!} f'''(z) \cdot \lambda^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \frac{d^n}{dz^n} f(z) \quad (35)$$

Für die GAUSS-Glockenkurve bedeutet dies:

$$\begin{aligned} f(z + \lambda) &= e^{-(z+\lambda)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} \\ f(z + \lambda) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} (-1)^n H_n(z) e^{-z^2} \end{aligned} \quad (36)$$

Vertauscht man λ durch $-\lambda$ und beachtet man $(-1)^n (-1)^n = 1$, so erhält man:

$$f(z - \lambda) = e^{-(z-\lambda)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} H_n(z) e^{-z^2} \quad (37)$$

und damit schließlich:

$$e^{-z^2} \cdot e^{-(z-\lambda)^2} = e^{-\lambda^2+2\lambda z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} H_n(z) \quad (38)$$

Die HERMITE-Polynome ergeben sich also aus einer TAYLOR-Entwicklung der Funktionen $e^{-\lambda^2+2\lambda z}$ nach Potenzen von λ . Sie heisst deshalb auch die **erzeugende Funktion der HERMITE-Polynome**.

Differenziert man die letzte Gleichung nach z , so erhält man:

$$2\lambda \cdot e^{-\lambda^2+2\lambda z} = 2\lambda \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} H_n(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \frac{d}{dz} H_n(z) \quad (39)$$

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} 2 \frac{\lambda^{n+1}}{n!} H_n(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \frac{d}{dz} H_n(z) \\ \sum_{n=1}^{\infty} 2n \frac{\lambda^n}{n!} H_{n-1}(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \frac{d}{dz} H_n(z) \end{aligned} \quad (40)$$

Vergleicht man die Koeffizienten mit gleicher Potenz, so erhält man:

$$\frac{d}{dz} H_n(z) = 2n \cdot H_{n-1}(z), \quad n = 1, 2, \dots \quad (41)$$

Auf die gleiche Weise erhält man durch Differenziation von (38) nach λ :

$$H_n(z) = 2z H_{n-1}(z) - 2(n-1) H_{n-2}(z) \quad (42)$$

Um die Differenzialgleichung nun herleiten zu können, müssen wir noch eine dritte Beziehung dieser Art ableiten. Dazu gehen wir von Gleichung (28) aus:

$$\frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} = (-1)^n H_n(z) \cdot e^{-z^2} \Rightarrow \frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}} e^{-z^2} = (-1)^{n-1} H_{n-1}(z) \cdot e^{-z^2} \quad (43)$$

Differenziert man den zweiten Zeil der Folgerung nach z , so erhält man:

$$(-1)^n H_n(z) \cdot e^{-z^2} = \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2} = (-1)^{n-1} \left(\frac{d}{dz} H_{n-1}(z) \cdot e^{-z^2} - 2z \cdot e^{-z^2} \cdot H_{n-1}(z) \right) \quad (44)$$

und damit dann:

$$H_n(z) = 2z \cdot H_{n-1}(z) - \frac{d}{dz} H_{n-1}(z) \quad (45)$$

Differenziert man nun (40) nach z und berücksichtigt man dann Gleichung (45), so erhält man die Behauptung::

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dz^2} H_n(z) &= 2n \cdot \frac{d}{dz} H_{n-1}(z) \\ &= 2n \cdot (2z \cdot H_{n-1}(z) - H_n(z)) \\ &= 2n \cdot \left(2z \frac{1}{2n} \frac{d}{dz} H_n(z) - H_n(z) \right) \\ &= 2z \cdot \frac{d}{dz} H_n(z) - 2n \cdot H_n(z) \end{aligned} \quad (46)$$