

## Vorlesungen über Quantenmechanik - Vorlesung 12

JOCHEN GEPPERT / DIDAKTIK DER PHYSIK

Wintersemester

ABSTRACT. In dieser Vorlesung werden der zwei- und dreidimensionale harmonische Oszillator besprochen.

### 1. DER ZWEIDIMENSIONALE HARMONISCHE OSZILLATOR

#### Maple-Datei zur Vorlesung:

- QMVor12Pr1.mws (Zweidim. harm. Oszillator)

In dieser Vorlesung verallgemeinern wir die Ergebnisse für den eindimensionalen harmonischen Oszillator auf den Fall des zwei- und dreidimensionalen harmonischen Oszillators.

**1.1. Produktzustände.** Ein physikalisches System<sup>1</sup> habe einen HAMILTON-Operator<sup>2</sup> der Form:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \quad (1)$$

Der HAMILTON-Operator lasse sich also in eine Summe aus zwei (oder auch mehreren) HAMILTON-Operatoren aufspalten. Wir können uns in diesem Fall das System aus zwei Teilen aufgebaut denken, die durch  $\hat{H}_1$  und  $\hat{H}_2$  beschrieben werden.

Wir nehmen nun an, dass das Eigenwertproblem für  $\hat{H}_1$ , wie auch für  $\hat{H}_2$  gelöst sei:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 \phi_n &= \varepsilon_n \phi_n \\ \hat{H}_2 \xi_m &= \varepsilon_m \xi_m \end{aligned} \quad (2)$$

Dann sind die Produkte:

$$\psi_{nm} = \phi_n \cdot \xi_m \quad (3)$$

Eigenfunktionen von  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ :

$$\hat{H} \psi_{nm} = E_{nm} \psi_{nm}, \quad E_{nm} = \varepsilon_n + \varepsilon_m \quad (4)$$

Wir bezeichnen (3) als **Produktwellenfunktionen** der **Produktzustände**  $\psi_{nm}$ . Ohne Begründung sei angemerkt, dass diese Wellenfunktionen eine vollständige Lösung des Eigenwertproblems für  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$  darstellen. Die hier skizzierte Struktur lässt sich leicht auf den Fall von mehr als zwei unabhängigen Teilsystemen übertragen werden.

---

<sup>1</sup>In unserem Fall dann ein zwei- oder dreidimensionaler harmonischer Oszillator.

<sup>2</sup>Siehe Skript 3 zur *Quantenmechanik*, Gleichung (19).

**Bemerkungen:**

Einige Beispiele für solche Systeme (1) sind:

1. Zwei Teilchen, die sich unabhängig voneinander in einem Potenzial bewegen. Die Verallgemeinerung auf  $Z$  Elektronen im Coulombpotenzial eines Atomkerns führt zum Schalenmodell des Atoms.
2. Der zweidimensionale (dreidimensionale) harmonische Oszillator lässt sich als Summe von zwei (drei) unabhängigen eindimensionalen harmonischen Oszillatoren schreiben. Dies wird im Folgenden näher ausgeführt.

**1.2. Die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung.** Die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung des zweidimensionalen harmonischen Oszillators lautet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x, y) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \varphi(x, y) \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2) = E \cdot \varphi(x, y) \quad (5)$$

Klassisch entspricht dies der Situation eines Massenpunktes der sich auf einer ebenen reibungsfreien Platte in einem Potenzial der folgenden Form bewegt:

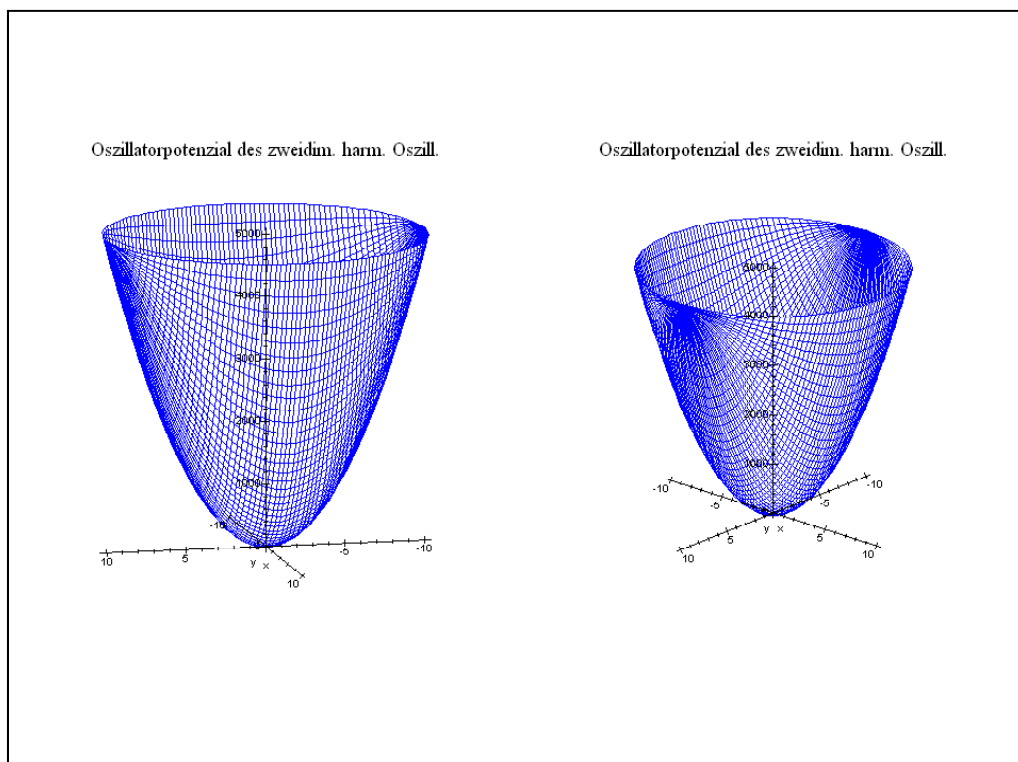


Figure 1: Potenzial des zweidimensionalen harmonischen Oszillators

Man kann sich vorstellen, dass ein Massenpunkt um den Ruhepunkt der Feder (= Ursprung des Koordinatensystems) gelagert auf dem Tisch schwingen kann<sup>3</sup>.

<sup>3</sup>Im Programm QMVor12Pr1.mws ist eine Animation der Situation zu sehen.

Man lenkt ihn zu Beginn der Bewegung aus und dann schwingt er auf einer geraden Linie mit der Frequenz  $\omega$  durch den Ursprung des Koordinatensystems.

Wie man an der obigen SCHRÖDINGER-Gleichung sehen kann, entspricht sie der Situation der Gleichung (1), man kann sie nämlich über einen Produktansatz:

$$\varphi(x, y) = \varphi_{n_x}(x) \cdot \varphi_{n_y}(y) \quad (6)$$

überführen in:

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi_{n_y}(y) \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_{n_x}(x) + \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi_{n_x}(x) \cdot \frac{\partial^2}{\partial y^2} \varphi_{n_y}(y) + \\ +\frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 \end{array} \right\} = (E_x + E_y) \varphi_{n_x}(x) \cdot \varphi_{n_y}(y)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi_{n_x}(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_{n_x}(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi_{n_y}(y)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \varphi_{n_y}(y) + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 \end{array} \right\} = E_x + E_y$$

Damit erhält man, da x unabhängig von y ist:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi_{n_x}(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_{n_x}(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 = E_x \quad (7)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi_{n_y}(y)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \varphi_{n_y}(y) + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 = E_y$$

Das sind jeweils die zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichungen für den eindimensionalen harmonischen Oszillator<sup>4</sup> und wir kennen die Lösung bereits<sup>5</sup>:

$$\varphi_{n_x}(x) = c_{n_x} H_{n_x} \left( \frac{x}{b} \right) e^{-\frac{x^2}{2b^2}}, \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad n_x = 1, 2, \dots, \quad E_{n_x} = \left( n_x + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (8)$$

$$\varphi_{n_y}(y) = c_{n_y} H_{n_y} \left( \frac{y}{b} \right) e^{-\frac{y^2}{2b^2}}, \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad n_y = 1, 2, \dots, \quad E_{n_y} = \left( n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (9)$$

Damit erhalten wir die Gesamtwellenfunktion des zweidimensionalen harmonischen Oszillators zu:

$$\begin{aligned} \varphi_{n_x n_y}(x, y) &= \varphi_{n_x}(x) \cdot \varphi_{n_y}(y) \\ &= c_{n_x} H_{n_x} \left( \frac{x}{b} \right) e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \cdot c_{n_y} H_{n_y} \left( \frac{y}{b} \right) e^{-\frac{y^2}{2b^2}}, \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \end{aligned} \quad (10)$$

zum Energiewert:

$$\begin{aligned} E_{n_x n_y} &= E_{n_x} + E_{n_y} \\ &= (n_x + n_y + 1) \hbar \omega \end{aligned} \quad (11)$$

<sup>4</sup> Siehe Skript 11 zur *Quantenmechanik*, Gleichung (5).

<sup>5</sup> Siehe Skript 11 zur *Quantenmechanik*, Gleichung (22).

Die Koeffizienten  $c_{n_x}$  und  $c_{n_y}$  werden wie im eindimensionalen Fall aus der Normierung gewonnen<sup>6</sup>:

$$\begin{aligned} \int_{x=-\infty}^{\infty} \int_{y=-\infty}^{\infty} \left| \varphi_{n_x n_y}(x, y) \right|^2 dx \cdot dy &= 1 \\ \int_{x=-\infty}^{\infty} \int_{y=-\infty}^{\infty} \left| \varphi_{n_x n_y}(x, y) \right|^2 dx \cdot dy &= c_{n_x}^2 \int_{x=-\infty}^{\infty} H_{n_x}^2 \left( \frac{x}{b} \right) e^{-\frac{x^2}{b^2}} dx \\ &\quad \cdot c_{n_y}^2 \int_{y=-\infty}^{\infty} H_{n_y}^2 \left( \frac{y}{b} \right) e^{-\frac{y^2}{b^2}} dy \end{aligned}$$

und damit:

$$\begin{aligned} c_{n_x}^2 \int_{x=-\infty}^{\infty} H_{n_x}^2 \left( \frac{x}{b} \right) e^{-\frac{x^2}{b^2}} dx &= 1 \Rightarrow c_{n_x} = \frac{1}{\sqrt{\int_{x=-\infty}^{\infty} H_{n_x}^2 \left( \frac{x}{b} \right) e^{-\frac{x^2}{b^2}} dx}} \\ c_{n_y}^2 \int_{y=-\infty}^{\infty} H_{n_y}^2 \left( \frac{y}{b} \right) e^{-\frac{y^2}{b^2}} dy &= 1 \Rightarrow c_{n_y} = \frac{1}{\sqrt{\int_{y=-\infty}^{\infty} H_{n_y}^2 \left( \frac{y}{b} \right) e^{-\frac{y^2}{b^2}} dy}} \end{aligned} \quad (12)$$

Ähnlich wie beim eindimensionalen harmonischen Oszillator sind die Anregungsenergien Vielfache von  $\hbar\omega$ . Mit Ausnahme des Grundzustands:

$$E_0 = \hbar\omega, \varphi_{00}(x, y) \quad (13)$$

sind jedoch alle Eigenwerte entartet. So werden Energiewerte genannt, zu denen mehr als eine Eigenfunktion gehört. Zum ersten angeregten Zustand  $E_{10} = \frac{5}{2}\hbar\omega$  gehören zwei Eigenfunktionen:

$$E_{10} = E_{01} = \frac{5}{2}\hbar\omega, \varphi_{10}(x, y), \varphi_{01}(x, y) \quad (14)$$

Natürlich ist auch die Summe (Linearkombination) dieser beiden Lösungen wieder eine Lösung zum selben Energiewert.

---

<sup>6</sup>Beispiele für die Berechnung von Doppelintegralen sind im Skript 1 zur *Einführung in die Quantenphysik* zu finden. Die Berechnungsmethode, die dort durchgeführt wurde, entspricht der hier benötigten.

Betrachten wir einige Betragsquadrate der im Programm berechneten Wellenfunktionen<sup>7</sup>:

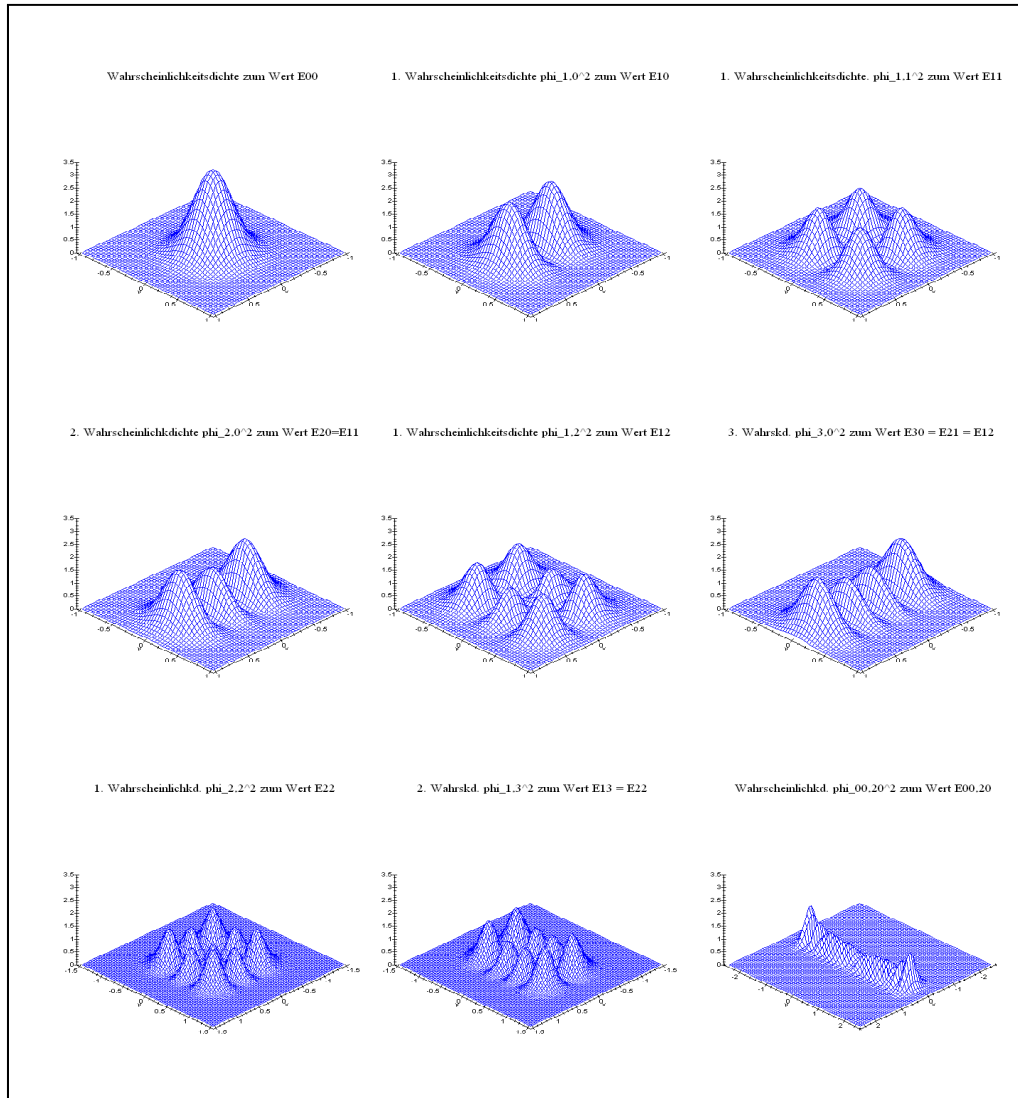


Figure 2: Normierte stationäre Wahrscheinlichkeitsdichten des zweidimensionalen harm. Oszillators.

Zum Verständnis dieser Bilder beachte man immer die Potenzialdarstellung im ersten Bild. Für die zweite Wellenfunktion zum Energiewert  $E_{10}$  erhält man:

Beachte die Drehbeziehung zwischen beiden Lösungen, man erhält die zweite Lö-

<sup>7</sup>Eine genaueres Bild ergibt sich im Programm, indem man die Graphik bei festgehaltener linker PC-Maustaste dreht.

sung durch Drehung der ersten (und umgekehrt natürlich).  
Im Maple-Programm werden für den Energiewert:

$$E = 21\hbar\omega \quad (15)$$

alle Lösungen (ohne Linearkombinationen) dargestellt. Betrachten wir ein Beispiel:

In dieser Darstellung kann man die Aufenthaltswahrscheinlichkeit zum Wert:

$$E_{1010} = 21\hbar\omega \quad (16)$$

sehen.

Die Fläche, für die die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ungleich Null ist, wird mit steigender Energie immer größer, dies entspricht dem klassischen Verhalten, da dort einer größeren Energie auch eine größere Amplitude entspricht.

**Bemerkung:**

Ein Grund für die Entartung der Energieniveaus<sup>8</sup> ist die Symmetrie des Potentials und damit des HAMILTON-Operators. Der HAMILTON-Operator:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (17)$$

ändert sich nicht bei Drehungen des Koordinatensystems. Daher muss man wieder eine Lösung erhalten, wenn man eine bestimmte Lösung um einen bestimmten Winkel dreht. Das kann, muss aber nicht, eine andere Lösung sein.

**1.3. Bewegung eines GAUSS-Wellenpakets.** Die Lösung für die Bewegung eines GAUSS-Wellenpakets im eindimensionalen Fall wurde in der Vorlesung 10 betrachtet. Die Lösung wurde in einem ergänzenden Kapitel mathematisch hergeleitet. Da wir die Struktur der Lösung des zweidimensionalen harmonischen Oszillators kennen, kann man die eindimensionale Lösung<sup>9</sup> an dieser Stelle benutzen:

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{1}{2}i\omega t} \frac{1}{\sqrt{b}} \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \cdot e^{\left(-\frac{a_x^2 + 2x^2}{4b^2}\right)} \exp\left(-\frac{a^2}{4b^2}e^{-2i\omega t} + 2\frac{a}{2b}e^{-i\omega t}\frac{x}{b}\right) \quad (18)$$

Entsprechendes gilt für die Anfangsbedingung:

$$\psi(x, y, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-a_x)^2\right)} e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(y-a_y)^2\right)} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \psi(x, y, t) = & e^{-\frac{1}{2}i\omega t} \frac{1}{\sqrt{b}} \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \cdot e^{\left(-\frac{a_x^2 + 2x^2}{4b^2}\right)} \exp\left(-\frac{a_x^2}{4b^2}e^{-2i\omega t} + 2\frac{a_x}{2b}e^{-i\omega t}\frac{x}{b}\right) \cdot \\ & \cdot e^{\left(-\frac{a_y^2 + 2y^2}{4b^2}\right)} \exp\left(-\frac{a_y^2}{4b^2}e^{-2i\omega t} + 2\frac{a_y}{2b}e^{-i\omega t}\frac{y}{b}\right) \end{aligned} \quad (20)$$

<sup>8</sup>Zu einem Energiewert gehören also mehrere Lösungen.

<sup>9</sup>Siehe Gleichung (41) im Skript 11 zur *Quantenmechanik*.

Man erhält dann die erwartete Bewegung der Schwingung des Wellenpakets:

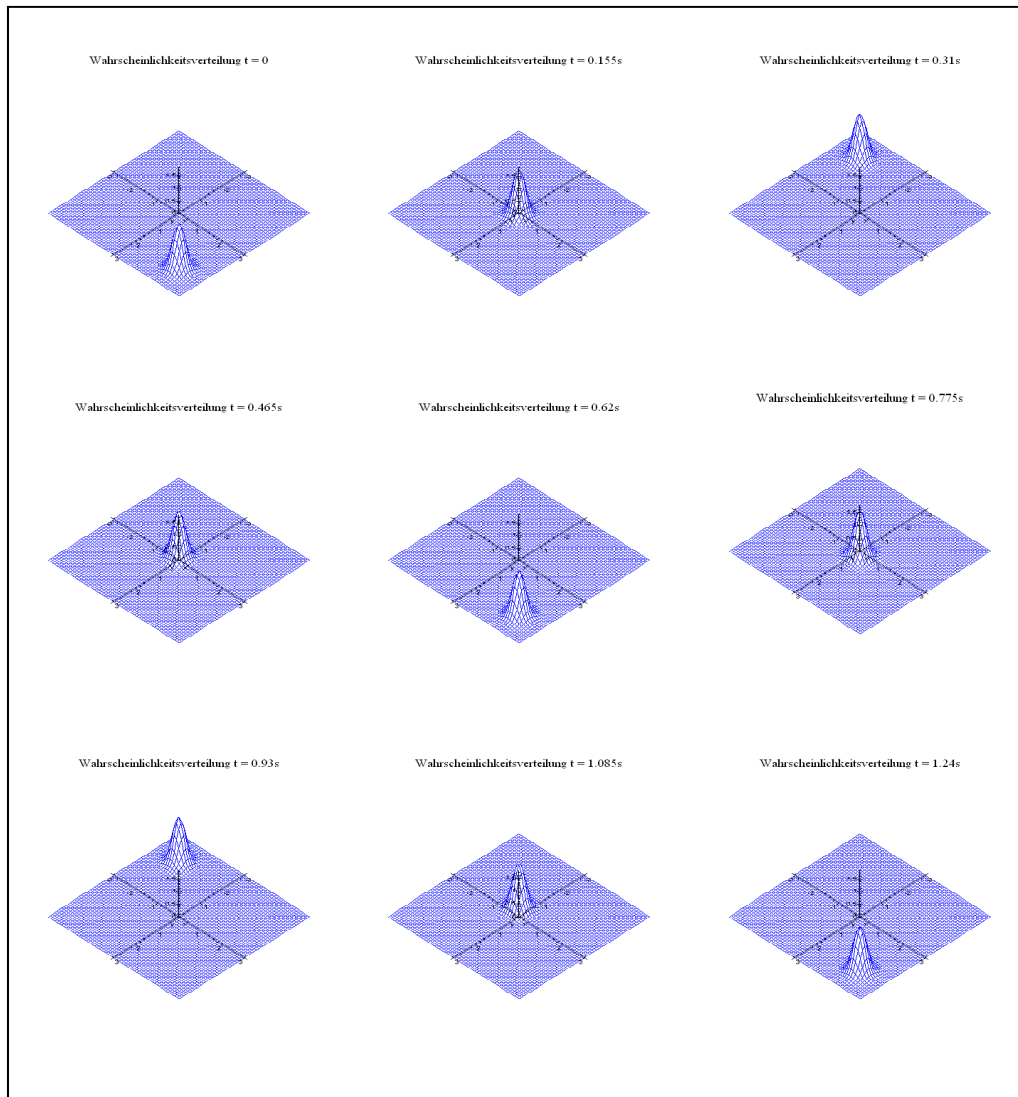


Figure 3: Zeitliche Entwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte eines zwei-dimensionalen harm. Oszillators. Die Einheit der x-, bzw. y-Achse ist m.

Das Wellenpaket (die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte) wird am Anfangsort zentriert (entspricht dem klassischen Auslenken der Feder) und dann quasi "losgelassen", also dem Oszillatorpotenzial ausgesetzt.

Das Wellenpaket erreicht den Mittelpunkt des Potenzials und schwingt weiter zum Umkehrpunkt:

Im Programm ist noch der Vergleich zur klassischen Situation eingefügt, aber auch

anhand dieser Bilder kann man den Unterschied aber auch die Ähnlichkeit zum klassischen Fall gut erkennen.

## 2. DER DREIDIMENSIONALE OSZILLATOR

Nach der eingehenden Behandlung des zweidimensionalen harmonischen Oszillators ist die Behandlung des dreidimensionalen natürlich nur noch eine Formsache. Man erhält die Wellenfunktionen des dreidimensionalen Oszillators analog als Produkt der Wellenfunktionen des eindimensionalen harmonischen Oszillators:

$$\varphi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \varphi_{n_x}(x) \cdot \varphi_{n_y}(y) \cdot \varphi_{n_z}(z) \quad (21)$$

wobei  $\varphi_{n_x}(x)$ ,  $\varphi_{n_y}(y)$ ,  $\varphi_{n_z}(z)$  Lösungen des eindimensionalen harmonischen Oszillators sind. Die Wellenfunktion  $\varphi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z)$  ist dann eine Lösung zum Energiewert:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega \quad (22)$$

Natürlich ist jeder Energiewert (abgesehen von  $E_{000}$ ) entartet, das heisst zu einem festen Energiewert gehören mehrere verschiedene Wellenfunktionen. Zum ersten angeregten Zustand gibt es drei Eigenfunktionen:

$$E_{100} = E_{010} = E_{001} = \frac{5}{2} \hbar \omega \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \varphi_{100}(x, y, z) &\sim x \cdot e^{\left( -\frac{x^2+y^2+z^2}{2} \right)} \\ \varphi_{010}(x, y, z) &\sim y \cdot e^{\left( -\frac{x^2+y^2+z^2}{2} \right)} \\ \varphi_{001}(x, y, z) &\sim z \cdot e^{\left( -\frac{x^2+y^2+z^2}{2} \right)} \end{aligned} \quad (24)$$

Für den zweiten angeregten Zustand gibt es bereits sechs entartete Eigenfunktionen:

$$E_{110} = E_{101} = E_{011} = E_{200} = E_{020} = E_{002} = \frac{7}{2} \hbar \omega \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \varphi_{110}(x, y, z) &\sim xy \cdot e^{\left( -\frac{x^2+y^2+z^2}{2} \right)} \\ \varphi_{101}(x, y, z) &\sim xz \cdot e^{\left( -\frac{x^2+y^2+z^2}{2} \right)} \\ \varphi_{011}(x, y, z) &\sim yz \cdot e^{\left( -\frac{x^2+y^2+z^2}{2} \right)} \\ \varphi_{200}(x, y, z) &\sim \left( x^2 - \frac{1}{2} \right) \cdot e^{\left( -\frac{x^2+y^2+z^2}{2} \right)} \\ \varphi_{020}(x, y, z) &\sim \left( y^2 - \frac{1}{2} \right) \cdot e^{\left( -\frac{x^2+y^2+z^2}{2} \right)} \\ \varphi_{002}(x, y, z) &\sim \left( z^2 - \frac{1}{2} \right) \cdot e^{\left( -\frac{x^2+y^2+z^2}{2} \right)} \end{aligned} \quad (26)$$