

Vorlesungen über Quantenmechanik - Vorlesung 11

JOCHEN GEPPERT / DIDAKTIK DER PHYSIK

Wintersemester

ABSTRACT. Entwickelt wird in dieser Vorlesung die SCHRÖDINGER-Gleichung des harmonischen Oszillators. Die Ergebnisse werden mit dem klassischen Fall verglichen.

1. LÖSUNG DER SCHRÖDINGER-GLEICHUNG DES HARMONISCHEN OSZILLATORS

Maple-Datei zur Vorlesung:

- QMVor11Pr1.mws (Lösung SG, Animation Wellenpaket)

Bereits aus der letzten Vorlesung kennen wir das Potenzial eines eindimensionalen harmonischen Oszillators mit Federkonstante k als:

$$V_{\text{Osz}} = \frac{1}{2} k x^2 \quad (1)$$

In dieser Vorlesung soll nun die Bewegung eines quantenmechanischen Teilchens unter dem Einfluss dieses Potenzials untersucht werden. Die Kreis- oder Eigenfrequenz ω des harmonischen Oszillators hängt über:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \Leftrightarrow k = m\omega^2 \quad (2)$$

mit der Federkonstante k zusammen. Damit können wir das Potenzial auch schreiben als:

$$V_{\text{Osz}} = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (3)$$

Und mit dieser Potenzialfunktion müssen wir dann die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung lösen.

1.1. Die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung. Zu lösen ist also nun die Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + V_{\text{Osz}}(x) \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (4)$$

also konkret:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \varphi(x) - E \varphi(x) = 0 \quad (5)$$

Wir haben hier eine Differenzialgleichung neuen Typs vor uns, wie wir ihn bisher im Rahmen der Vorlesung noch nicht kennengelernt haben. Der Lösungsweg zur Lösung dieser Gleichung ist trickreich, aber nachvollziehbar, da wir aus der letzten Vorlesung bereits die Differenzialgleichung der HERMITE-Polynome kennen.

Wenn man keinerlei Idee zur Lösung einer Differenzialgleichung besitzt, ist es immer sinnvoll, sie für bestimmte Grenzwerte zu betrachten. Vielleicht vereinfacht sie sich dann und man erfährt etwas über die mögliche Struktur der Lösung.

Betrachtet man die Gleichung für sehr große $|x|$, so stellt man fest, dass der Term $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \phi(x)$ sehr viel größer wird, als der Term $E\phi(x)$. Mit anderen Worten, in diesem Grenzfall nähert sich obige Gleichung der Gestalt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi_1(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \varphi_1(x) = 0 \quad (6)$$

Zur Unterscheidung wurde $\varphi_1(x)$ statt $\varphi(x)$ geschrieben. Natürlich gilt:

$$\varphi(x) \longrightarrow \varphi_1(x) \text{ für große } |x| \quad (7)$$

Formt man Gleichung (6) noch ein wenig um:

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi_1(x) - \frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} \varphi_1(x) = 0 \quad (8)$$

so erhält man eine Gleichung, wie sie ganz ähnlich schön gelöst wurde. Man sieht ja sofort, dass die zweite Ableitung so aussehen soll wie die Ausgangsfunktion, nur multipliziert mit x^2 . Ein Ansatz der Art:

$$\varphi_1(x) = e^{Cx^2} \quad (9)$$

müsste damit zum Erfolg führen.

Setzt man diesen Ansatz ein, so erhält¹ man die folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} 2C \cdot e^{Cx^2} + 4C^2 x^2 \cdot e^{Cx^2} - \frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} e^{Cx^2} &= 0 \\ e^{Cx^2} \left\{ 2C + 4C^2 x^2 - \frac{m^2 \omega^2 x^2}{\hbar^2} \right\} &= 0 \\ e^{Cx^2} \{ 2C\hbar^2 + 4C^2 x^2 \hbar^2 - m^2 \omega^2 x^2 \} &= 0 \\ 2C\hbar^2 + 4C^2 x^2 \hbar^2 - m^2 \omega^2 x^2 &= 0 \end{aligned} \quad (10)$$

Da sehr große Werte von $|x|$ betrachtet werden, ist in diesem Falle der Term $2C\hbar^2$ im Verhältnis zu den beiden anderen vernachlässigbar. Damit reduziert sich die Gleichung für die Unbekannte C auf:

$$4C^2 x^2 \hbar^2 - m^2 \omega^2 x^2 = 0 \quad (11)$$

Mit Maple erhält man zwei Lösungen für die Konstante C:

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} \Rightarrow \varphi_1(x) = e^{\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2} \\ C_2 &= -\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} \Rightarrow \varphi_2(x) = e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2} \end{aligned} \quad (12)$$

¹ Siehe QMVorl11Pr1.mws.

Eine Normierung der Wellenfunktion ist nur im zweiten Falle gewährleistet. Die erste Lösung für $\varphi_1(x)$ wird für große x immer größer und wird daher eine Normierung unmöglich machen, auch wenn wir von der letztendlichen Wellenfunktion noch ein Stück entfernt sind. Wir erlauben also nur:

$$\varphi_1(x) = e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \quad (13)$$

Natürlich unterscheidet sich die Lösung der obigen SCHRÖDINGER-Gleichung noch von dieser Funktion und an dieser Stelle kann man jetzt verschiedene Möglichkeiten testen, diesen Unterschied mathematisch zu beschreiben. Als sinnvoll hat es sich erwiesen, diesen Unterschied in eine Funktion $f(x)$ zu verpacken und dann den folgenden Ansatz für die Lösung zu verwenden:

$$\varphi(x) = f(x) \cdot \varphi_1(x) = f(x) \cdot e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \quad (14)$$

Durch Einsetzen dieses Ansatzes in Gleichung (5) hofft man auf eine leichter lösbare Gleichung für $f(x)$ zu kommen. Man erhält nach Einsetzen²:

$$e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \cdot \left\{ \frac{d^2}{dx^2}f(x) - \frac{2m\omega}{\hbar}x\frac{d}{dx}f(x) + \left(\frac{2mE}{\hbar} - \frac{m\omega}{\hbar}\right)f(x) \right\} = 0 \quad (15)$$

$$\frac{d^2}{dx^2}f(x) - \frac{2m\omega}{\hbar}x\frac{d}{dx}f(x) + \left(\frac{2mE}{\hbar} - \frac{m\omega}{\hbar}\right)f(x) = 0$$

An dieser Stelle kommt dann nun wie bereits mehrfach angedeutet die Differenzialgleichung der HERMITE-Polynome ins Spiel³:

$$\frac{d^2}{dx^2}H_n\left(\frac{x}{b}\right) - \frac{2}{b^2}x\frac{d}{dx}H_n\left(\frac{x}{b}\right) + \frac{2n}{b^2}H_n\left(\frac{x}{b}\right) = 0 \quad (16)$$

Vergleicht man beide Gleichungen und setzt man:

$$f(x) \rightarrow f_n(x) = H_n\left(\frac{x}{b}\right) \quad (17)$$

so erhält man aus dem Vergleich der beiden Gleichungen:

$$\frac{1}{b^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \Leftrightarrow b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (18)$$

$$\frac{2n}{b^2} = \frac{2mE}{\hbar} - \frac{m\omega}{\hbar} \quad (19)$$

Aus der letzten Gleichung erhält man dann ein Ergebnis für die Energie:

$$E \rightarrow E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (20)$$

Man erhält also wieder den Fall diskreter Energiewerte. Ein Teilchen, dass sich im Einfluss eines Potenzials eines harmonischen Oszillators aufhält kann also nicht jede

²Siehe wiederum im beigefügten Maple-Programm.

³Siehe Skript 10 zur Quantenmechanik, Gleichung (34).

Energie annehmen. Im klassischen Fall ist das immer möglich⁴ vor allen Dingen ist die niedrigste Energie die ein Teilchen besitzen kann nicht Null, sondern:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (21)$$

Dieses Ergebnis stellt einen weiteren Unterschied zum klassischen Fall dar, denn $E = 0$ ist natürlich klassisch möglich. Die Feder wird dann überhaupt nicht ausgelenkt und verbleibt in ihrem Gleichgewichtspunkt. Quantenmechanisch muss natürlich $E = 0$ für den harmonischen Oszillator verboten sein, denn wegen $E = 0$ wäre auch $x = 0$ (sowieso), aber auch $p = 0$. Mit anderen Worten Ort und Impuls wären gleichzeitig scharf, was einen Widerspruch zur HEISENBERG-Unbestimmtheitsrelation bedeuten würde. *Es ist also nicht möglich, ein Teilchen in einem Oszillatorpotenzial wirklich zur Ruhe zu bringen!*

Die Lösung, die man schließlich erhält ist:

$$\varphi_n(x) = c_n H_n \left(\frac{x}{b} \right) e^{-\frac{x^2}{2b^2}}, \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (22)$$

Die Koeffizienten c_n bestimmt man aus der Normierungsbedingung:

$$\begin{aligned} \int_{x=-\infty}^{\infty} |\varphi_n(x)|^2 dx &= c_n^2 \int_{x=-\infty}^{\infty} H_n^2 \left(\frac{x}{b} \right) e^{-\frac{x^2}{b^2}} dx = 1 \\ c_n &= \frac{1}{\sqrt{\int_{x=-\infty}^{\infty} H_n^2 \left(\frac{x}{b} \right) e^{-\frac{x^2}{b^2}} dx}} \end{aligned} \quad (23)$$

Im Programm wird dies für die ersten $n = 1 \dots 60$ beispielhaft durchgeführt - die Integrale müssen numerisch berechnet werden - wobei es auch kein Problem ist, n noch weiter zu vergrößern.

⁴Man kann ja über die Anfangsauslenkung der Feder jede Energie vorgeben. Von einer Materialermüdung der Feder sehen wir dabei natürlich ab.

1.2. Betrachtung der stationären Lösungen. Im Maple-Programm werden die Wellenfunktionen und ihr Betragsquadrat explizit berechnet und auch graphisch dargestellt. Im Folgenden werden ein paar Beispielwellenfunktionen (beachte $\hbar = m = 1$) betrachtet:

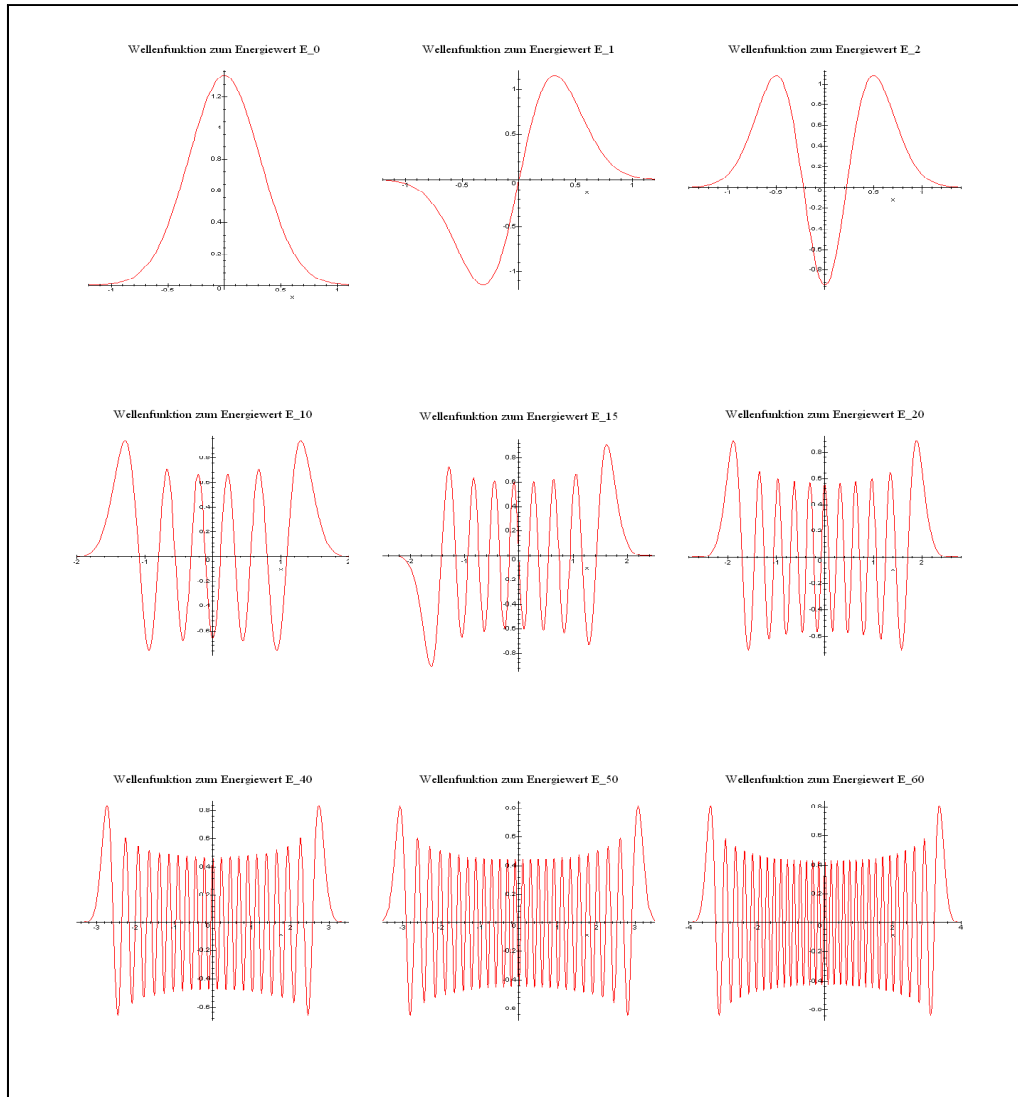


Figure 1: Stationäre Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators

Betrachtet man die Wellenfunktionen mit zunehmenden Energiewerten, so fällt auf, dass der Bereich auf der x-Achse, der nennenswert von Null verschieden ist, immer größer wird. Bedenkt man, dass das Quadrat dieser Funktionen ja die messbare Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist, so entspricht dieses Verhalten dem Verhal-

ten eines klassischen harmonischen Oszillators, wonach die Amplitude der Teilchenbewegung auch mit der Energie wächst⁵. Weiter kann man sehen, dass die Zahl der Nullstellen gleich der Zahl n der Energieniveaus ist - aber diesen Sachverhalt kannten wir bereits aus der Behandlung der HERMITE-Polynome.

Beispiel:

Wir betrachten die beiden stationären Zustände, beschrieben durch $\varphi_1(x)$ und $\varphi_2(x)$ die zu den beiden Energiewerten E_1 und E_2 gehören. Wir wissen bereits, dass dann auch die Wellenfunktion:

$$\varphi(x) := c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x) \text{ mit } |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad (24)$$

einen möglichen stationären Zustand eines Teilchens beschreibt, das sich im Einfluss eines harmonischen Oszillatorpotenzials befindet. Kann man nun für diesen Zustand eine Aussage über die Energie des Teilchens machen? Setzen wir diesen Zustand in die SCHRÖDINGER-Gleichung des harmonischen Oszillaors ein, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{Osz}\varphi(x) &= \hat{H}_{Osz}(c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x)) \\ &= c_1\hat{H}_{Osz}\varphi_1(x) + c_2\hat{H}_{Osz}\varphi_2(x) \\ &= c_1E_1\varphi_1(x) + c_2E_2\varphi_2(x) \end{aligned}$$

wir können allerdings in der letzten Zeile die Wellenfunktion $\varphi(x)$ nicht ausklammern. Das bedeutet konkret: **Im Zustand $\varphi(x)$ besitzt das Teilchen keine definierte Energie! Mit anderen Worten auch keine definierte kinetische sowie potenzielle Energie!**

Ein weiterer Trugschluss entsteht durch eine falsche Interpretation der Koeffizienten c_1 und c_2 . Beide bzw. ihr Betragsquadrat geben natürlich die Wahrscheinlichkeit an, bei einer Messung das Teilchen im Zustand φ_1 bzw. φ_2 zu finden. Mit anderen Worten also den Energiewert E_1 bzw. E_2 . Gilt also z.B.:

$$|c_1|^2 = 0.60 \text{ und } |c_2|^2 = 0.40$$

so bedeutet dies, dass man bei 10000 Messungen der Energie des Teilchens 6000 mal den Wert E_1 und 4000 mal den Wert E_2 erhält. Es bedeutet quantenmechanisch aber nicht, dass sich das Teilchen, wenn keine Messung durchgeführt wird in einem der beiden Zustände befindet (wahrscheinlich dann in φ_1)!! Die Konsequenz hieraus wäre dann nämlich, dass wir über:

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}mx^2$$

dem Teilchen einen exakten Impuls und einen exakten Ort zuordnen könnten. Dies wäre ein Widerspruch zur HEISENBERG-Unbestimmtheitsrelation!! Natürlich reizt dieser Widerspruch unser klassisch geprägtes Vorstellungsvermögen, denn wir haben unwillkürlich die Vorstellung, dass sich das Teilchen doch auf jeden Fall in irgend einem Zustand befinden müsse. Das Teilchen müsste doch eine feste Energie und damit einen festen Ort und Impuls besitzen, auch wenn nicht gemessen wird.

⁵Die Amplitude folgt ja direkt aus der Anfangsenergie - siehe Skript 10 zur Quantenmechanik.

1.3. Vergleich der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten. Bereits in der Vorlesung zum klassischen harmonischen Oszillator haben wir die klassische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte kennengelernt:

$$\frac{dP}{dx} = \frac{dt}{dx} \cdot \frac{1}{T} = \frac{dt}{dx} \cdot \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{m}{k}} \quad (25)$$

Im Folgenden vergleichen wir sie mit der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte die sich als Betragsquadrat der Wellenfunktion ergibt:

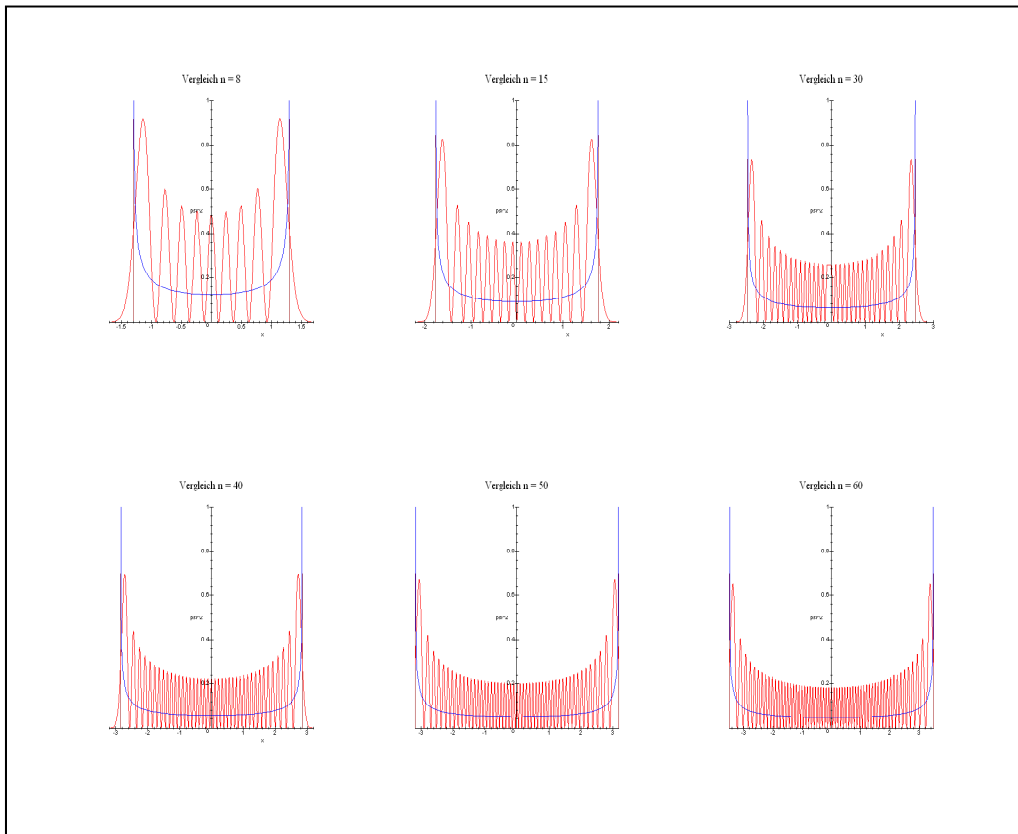


Figure 2: Vergleich der klassischen mit der quantenmechanischen Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte für eine Folge wachsender Quantenzahlen n . Die Einheit der x -Achse ist m , die der y -Achse ist $1/m$.

Betrachtet man die Bilder der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte, so kann man mit wachsendem n erkennen, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte an den klassischen Umkehrpunkten anwächst - und zwar relativ zum Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte nimmt ihre absoluten Maxima immer dichter an den beiden klassischen Umkehrpunkten an. Dieses Ergebnis erinnert an eine klassische Überlegung, die wir zu Beginn schon gemacht haben - an den Umkehrpunkten hat das Teilchen die Geschwindigkeit Null. Es verweilt also in einer

kleinen Umgebung um die Umkehrpunkte länger als sonst irgendwo während der Bewegung - genau hieran erinnert auch das Verhalten der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte! Man kann aber noch mehr erkennen, denn mit zunehmendem n werden sich die klassische und die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte immer ähnlicher. Die Wahrscheinlichkeitsaussagen des quantenmechanischen harmonischen Oszillators gehen also mit zunehmendem n in die des klassischen harmonischen Oszillator über. Darin liegt auch der Grund, dass man bei einer klassischen harmonischen Schwingung (Fadenpendel oder unsere Feder) keine quantenmechanischen Effekte beobachten kann. Die Gesamtenergie bei einer klassischen harmonischen Bewegung ist nämlich sehr viel größer als

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (26)$$

Betrachtet man beispielsweise in einem realistischen Fall eine Schwingung mit $\omega = \frac{1}{s}$ und einer Gesamtenergie von $E = 1$ J, so erhält man dann mit $E_0 = 10^{-34}$ J eine Quantenzahl des realistischen Zustands von $n = 10^{34}$. Man kann sich schon anhand der oben entwickelten Bilder vorstellen, dass für dieses riesige n beide Wahrscheinlichkeitsdichten asymptotisch sehr ähnlich sind.

1.4. Die zeitliche Entwicklung eines GAUSS-Pakets. Die allgemeine Lösung der zeitabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung ist uns bereits geläufig, sie lautet:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(x) \cdot e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \quad (27)$$

wobei die Koeffizienten a_n aus der Anfangsbedingung der Wellenfunktion folgen:

$$a_n := \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \cdot \psi(x, 0) dx \quad (28)$$

Im Falle des harmonischen Oszillators gilt nun:

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{b}} \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} H_n\left(\frac{x}{b}\right) e^{-\frac{x^2}{2b^2}}, \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (29)$$

wobei wir nicht gezeigt haben, dass man den Koeffizienten c_n auch ganz allgemein berechnen kann⁶.

Weiter gilt:

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (30)$$

Als Anfangsbedingung wählen wir nun die folgende GAUSS-Funktion:

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-a)^2)} \quad (31)$$

wobei der Koeffizient aus der Normierung stammt. Im Programm wird $m = \hbar = 1$ gesetzt. Man kann im Falle des harmonischen Oszillators die Funktion $\psi(x, t)$ direkt

⁶ Siehe Fliessbach: Quantenmechanik, B.I.-Verlag 1993.

berechnen. Die Rechnung ist ausführlich im nächsten Kapitel dargestellt, sie stellt ein Zusatzkapitel für mathematisch Interessierte dar und ist nicht wesentlich zum Verständnis der Bewegung des Wellenpakets.

Man erhält also nach längerer Rechnung:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{b\pi^{\frac{1}{4}}}} \cdot e^{\left(-\frac{a^2+2x^2}{4b^2} - i\frac{1}{2}\omega t\right)} \cdot e^{\left(-\frac{a^2}{4b^2}e^{-2i\omega t} + \frac{a}{b^2}xe^{-i\omega t}\right)}, \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (32)$$

Mit Maple wird das Betragsquadrat gebildet und man erhält die folgende Bewegung:

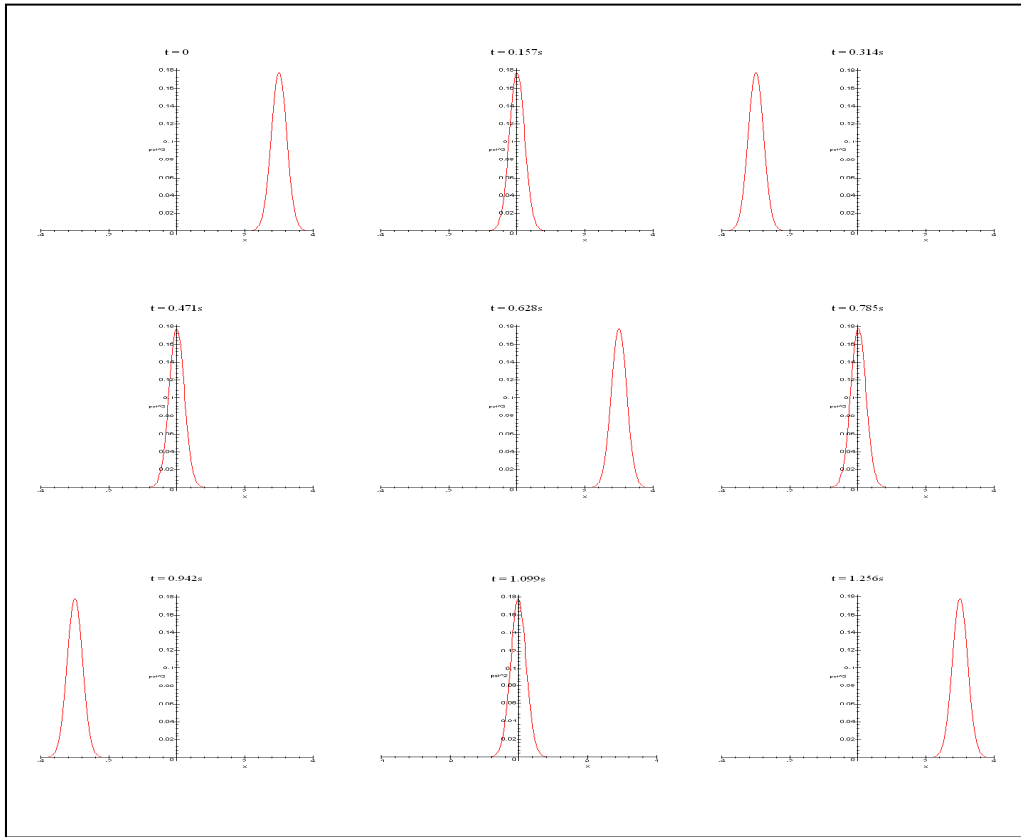


Figure 3: Zeitliche Entwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

Bemerkenswert ist die Konsistenz des Wellenpakets, es zerfließt oder zerteilt sich auch nicht. Man erhält ein hin und her schwingendes Wellenpaket, ganz wie man es erwartet. Im Programm kann man sich auch noch eine Animation der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsdichte sowie das klassische Pendant anschauen.

1.5. Mathematische Ergänzung: Entwicklung von $\psi(x, t)$. Beginnen wir mit der Anfangsbedingung:

$$\begin{aligned}
 \psi(x, 0) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-a)^2} \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2b^2}(x^2-2xa+a^2)} \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2b^2}x^2} e^{\left(\frac{2xa}{2b^2}-\frac{a^2}{2b^2}\right)} \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2b^2}x^2} e^{\left(\frac{ax}{b^2}-\frac{a^2}{2b^2}\right)} \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2b^2}x^2} e^{\left(\frac{ax}{b^2}-\frac{4a^2}{4b^2}\right)} e^{\left(\frac{a^2}{2b^2}\right)} \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2b^2}x^2} e^{\left(\frac{ax}{b^2}-\frac{4a^2}{4b^2}+\frac{3a^2}{4b^2}\right)} e^{\left(-\frac{3a^2}{4b^2}\right)} e^{\left(\frac{a^2}{2b^2}\right)} \\
 &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2b^2}x^2} e^{\left(-\frac{a^2}{4b^2}+\frac{ax}{b^2}\right)} e^{\left(-\frac{a^2}{4b^2}\right)}
 \end{aligned}$$

Mit Gleichung (38) aus dem Skript 10:

$$e^{-\lambda^2+2\lambda z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} H_n(z) \quad (33)$$

Wir betrachten nun den Term:

$$e^{\left(-\frac{a^2}{4b^2}+\frac{ax}{b^2}\right)}$$

Mit

$$\lambda = \frac{a}{2b}, \quad z = \frac{x}{b} \quad (34)$$

erhält man:

$$\begin{aligned}
 e^{\left(-\frac{a^2}{4b^2}+\frac{ax}{b^2}\right)} &= e^{-\lambda^2+2\lambda z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} H_n(z) \\
 e^{\left(-\frac{a^2}{4b^2}+\frac{ax}{b^2}\right)} &= \sum_{n=0}^{\infty} H_n\left(\frac{x}{b}\right) \frac{1}{n!} \left(\frac{a}{2b}\right)^n
 \end{aligned} \quad (35)$$

Man erhält also:

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2b^2}x^2} e^{\left(-\frac{a^2}{4b^2}\right)} \sum_{n=0}^{\infty} H_n\left(\frac{x}{b}\right) \frac{1}{n!} \left(\frac{a}{2b}\right)^n \quad (36)$$

Damit gilt (beachte Gleichung (28)):

$$H_n\left(\frac{x}{b}\right) e^{-\frac{1}{2b^2}x^2} = \phi_n(x) \sqrt{b\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{2^n n!}}, \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (37)$$

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{b\pi^{\frac{1}{4}}} e^{\left(-\frac{a^2}{4b^2}\right)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{a}{2b}\right)^n \sqrt{2^n n!} \phi_n(x) \quad (38)$$

Dann erhält man für die Koeffizientenentwicklung (siehe Gleichungen (26) und (27)):

$$a_k : = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k^*(x) \cdot \psi(x, 0) dx \quad (39)$$

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k^*(x) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{b\pi^{\frac{1}{4}}} e^{\left(-\frac{a^2}{4b^2}\right)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{a}{2b}\right)^n \sqrt{2^n n!} \varphi_n(x) \cdot dx \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{b\pi^{\frac{1}{4}}} e^{\left(-\frac{a^2}{4b^2}\right)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{a}{2b}\right)^n \sqrt{2^n n!} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k^*(x) \varphi_n(x) \cdot dx \\ &= e^{\left(-\frac{a^2}{4b^2}\right)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{a}{2b}\right)^n \sqrt{2^n n!} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k^*(x) \varphi_n(x) \cdot dx \end{aligned} \quad (40)$$

unter Beachtung von:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \varphi_n(x) \cdot dx &= \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi_n(x)|^2 dx = 1 \\ \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k^*(x) \varphi_n(x) \cdot dx &= 0 \text{ für } k \neq n \end{aligned}$$

erhalten wir:

$$a_n = e^{\left(-\frac{a^2}{4b^2}\right)} \frac{1}{n!} \left(\frac{a}{2b}\right)^n \sqrt{2^n n!} \quad (41)$$

Betrachten wir nun noch einmal die allgemeine Entwicklung (26) mit den Energiewerten des harmonischen Oszillators:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(x) \cdot e^{\left(-\frac{i}{\hbar} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) t\right)} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(x) \cdot e^{-i\omega n t} \cdot e^{-\frac{1}{2} i\omega t} \\ &= e^{-\frac{1}{2} i\omega t} \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(x) \cdot \left(e^{-i\omega t}\right)^n \\ &= e^{-\frac{1}{2} i\omega t} \sum_{n=0}^{\infty} e^{\left(-\frac{a^2}{4b^2}\right)} \frac{1}{n!} \left(\frac{a}{2b}\right)^n \sqrt{2^n n!} \frac{1}{\sqrt{b}} \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} H_n\left(\frac{x}{b}\right) e^{-\frac{x^2}{2b^2}} \cdot \left(e^{-i\omega t}\right)^n \\ &= e^{-\frac{1}{2} i\omega t} \frac{1}{\sqrt{b}} \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \cdot e^{\left(-\frac{a^2+2x^2}{4b^2}\right)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n\left(\frac{x}{b}\right) \left(\frac{a}{2b} e^{-i\omega t}\right)^n \\ &= e^{-\frac{1}{2} i\omega t} \frac{1}{\sqrt{b}} \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \cdot e^{\left(-\frac{a^2+2x^2}{4b^2}\right)} \exp\left(-\frac{a^2}{4b^2} e^{-2i\omega t} + 2\frac{a}{2b} e^{-i\omega t} \frac{x}{b}\right) \end{aligned}$$

In der letzten Zeile wurde wieder Gleichung (32) eingesetzt, man erhält also:

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{1}{2}i\omega t} \frac{1}{\sqrt{b}} \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} \cdot e^{\left(-\frac{a^2+2x^2}{4b^2}\right)} \exp\left(-\frac{a^2}{4b^2}e^{-2i\omega t} + 2\frac{a}{2b}e^{-i\omega t}\frac{x}{b}\right) \quad (42)$$