DER HARMONISCHE OSZILLATOR

Auszug aus der Vorlesung von Prof. K. Bleuler über
Quantenmechanik für Lehramtskandidaten
im Wintersemester 1978/79 an der Universität Bonn

Klassische Theorie und Bohrsche Quantentheorie

Immer wenn in der Physik Schwingungsphänomene auftreten, spielt bei der mathematischen Beschreibung der harmonische Oszillator eine wichtige Rolle. Dies reicht von einem einfachen Pendel in der klassischen Mechanik bis zur Theorie des Lichtes in der Quantenelektrodynamik. Meistens muß man sich freilich auf kleine Amplituden beschränken (sonst hat man es mit dem anharmonischen Oszillator zu tun). Andererseits ist es dann oft möglich, die Schwingungen formal zu entkoppeln und damit das Problem auf eine Dimension zu reduzieren (Normalschwingungen eines Festkörpers). Aus all diesen Gründen kommt gerade der quantenmechanischen Beschreibung des linearen harmonischen Oszillators eine besondere Bedeutung zu.

Standardbeispiel für einen harmonischen Oszillator ist ein Massenpunkt der Masse m, der unter dem Einfluß einer rücktreibenden Kraft (gemäß dem Hookeschen Gesetz) um eine Ruhelage $(x=0)$ schwingt. Es handelt sich um ein konservatives Kraftfeld mit dem Potential

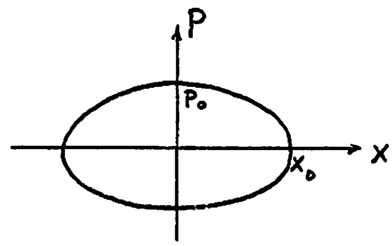
$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 .$$

Der hier eingeführte Parameter ω erweist sich dabei genau als die Frequenz der Schwingung, wenn man das Problem nach der klassischen Mechanik löst. Die Hamiltonfunktion lautet

$$(1) \qquad H(p,x) = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 .$$

Für jede Lösungskurve ist $H(p(t), x(t))=E$ zeitlich konstant. Stellt man die Bahnen im Phasenraum graphisch dar, erhält man also konzentrische Ellipsen mit den Halbachsen

$$p_o = \sqrt{2mE} \quad ; \quad x_o = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$



Wir können die verschiedenen Bahnen (Ellipsen) anstatt durch E auch durch das Wirkungsintegral

$$I = \oint p dx$$

indizieren. (Es ist zu bemerken, daß I ein koordinatenunabhängiger Ausdruck ist).
Die Integration ist im Sinne eines Wegintegrals im $\mathbb{R}^2$ über die gesamte geschlossene Bahn auszuführen. Gleichzeitig ist aber I genau die Fläche der Ellipse. Nach der Formel für den Flächeninhalt folgt daher:

(2) $$I = \pi p_o x_o = \frac{2\pi E}{\omega}$$

Der Übergang von der klassischen Mechanik zur alten Bohrschen Quantenmechanik besteht nun lediglich darin, daß das Wirkungsintegral nur diskrete Werte annehmen darf, die ganzzahlige Vielfache des Planckschen Wirkungsquantums h sind:

(3) $$\oint p dx = nh \qquad (n = 0,1,2...)$$

Aus (2) und (3) folgt somit, daß auch die Energie gequantelt ist:

$$E_n = \frac{1}{2\pi} I\omega = n\hbar\omega$$

Dieses Energiespektrum stimmt aber nicht mit dem Experiment überein, da alle Terme um $\hbar\omega/2$ zu niedrig liegen. Wir wenden uns daher jetzt der richtigen quantenmechanischen Behandlung des harmonischen Oszillators zu.

Die Schrödingergleichung

Die optisch mechanische Analogie liefert uns für das räumliche Verhalten eines Massenpunktes im Potential $V(\vec{x})$ ohne Berücksichtigung des zeitlichen Ablaufs die Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi = E\psi$$

für das Materiewellenfeld $\psi(\vec{x})$. In unserem Fall der eindimensionalen Bewegung reduziert sich der Laplaceoperator auf die zweite Ableitung, und wir erhalten, indem wir V einsetzen:

$$(4) \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x) = E\psi(x)$$

Es ist zweckmäßig, auf dimensionslose Größen umzurechnen. Die Einheiten für Länge und Energie, a_o bzw. $\bar{E}$, legen wir durch die Forderung fest, daß die Koeffizienten aller drei Terme in (4) gleich sind (ohne Faktor 1/2):

$$\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{a_o^2} = m\omega^2a_o^2 = \bar{E}$$

Hieraus ergeben sich:

$$(5) \qquad a_o = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad ; \quad \bar{E} = \hbar\omega$$

Ersetzen wir nun x und E durch ihre Maßzahlen in den Einheiten a_o bzw. $\bar{E}$ oder setzen wir einfach $a_o=\bar{E}=1$, dann geht (4) über in:

$$(6) \qquad -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{1}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x)$$

Diese Gleichung schreibt man auch in der Form

$$(7) \qquad H_{op}\psi = E\psi$$

wobei der Hamiltonoperator (ausgedrückt in natürlichen Einheiten) durch

$$H_{op} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x_{op}^2 \tag{8}$$

definiert ist. Der Operator x_{op} bedeutet die Multiplikation mit der Koordinate x. Die Differentiation d/dx und der Operator x_{op} wirken also auf Funktionen von x. Es handelt sich um lineare Operatoren,

$$A(\psi+\varphi) = A\psi + A\varphi \quad \text{und} \quad A(c\psi) = cA(\psi) \ .$$

Operatoren dieser Art kann man addieren, mit einer Zahl multiplizieren und untereinander multiplizieren (= hintereinander ausführen):

$$(A+B)(\psi) = A\psi + B\psi \ ; \ (cA)(\psi) = cA(\psi) \ ; \ (AB)\psi = A(B\psi)$$

Zunächst versuchen wir, eine partikuläre Lösung der Differentialgleichung (6) zu finden. Durch Erraten (Näherungslösung für $|x|\to\infty$) kommen wir zu dem Ansatz

$$\psi_o = e^{-x^2/2} \ ,$$

für den die linke Seite von (6) liefert:

$$\left(-\frac{1}{2}(-1+x^2) + \frac{1}{2}x^2\right) e^{-x^2/2} = \frac{1}{2}e^{-x^2/2}$$

Also ist ψ_o in der Tat eine Lösung, wenn $E=1/2$ ist.

<u>Die Leiteroperatoren</u>

Als nächstes wollen wir weitere Lösungen ermitteln, indem wir auf ψ_o wiederholt einen bestimmten Differentialoperator anwenden. Ein solcher Operator, der auf Funktionen von x wirkt, ist ganz allgemein aus x_{op} und der Differentiation d/dx in Gestalt von Summen, Produkten und skalaren Vielfachen aufgebaut. Statt x_{op} und d/dx kann man aber auch die beiden

Linearkombinationen

$$x_{op} + \frac{d}{dx} \quad \text{und} \quad x_{op} - \frac{d}{dx}$$

als Erzeugende nehmen. Diese beiden Operatoren sind nämlich unserem Problem in besonderem Maße angepaßt. Zuerst einmal gilt für die Wellenfunktion $e^{-x^2/2}$ die wichtige Relation

$$\left(x_{op} + \frac{d}{dx} \right) e^{-x^2/2} = 0 \tag{9}$$

die man einfach durch Ausdifferenzieren verifiziert. Ferner berechnen wir das Operatorprodukt

$$\left(x_{op} - \frac{d}{dx} \right) \left(x_{op} + \frac{d}{dx} \right) = x_{op}^2 - \frac{d}{dx}\, x_{op} + x_{op} \frac{d}{dx} - \frac{d^2}{dx^2} \, .$$

Die beiden mittleren Terme bilden, neben einem Vorzeichen, den Kommutator

$$\left[\frac{d}{dx}, x_{op}\right] = \mathbb{1} \tag{10}$$

der gleich dem Einheitsoperator ist. Der erste und vierte Term hingegen bilden zusammen bis auf den Faktor 1/2 genau den Hamiltonoperator (8). Also erhalten wir

$$H_{op} = \frac{1}{2} \left(x - \frac{d}{dx} \right) \left(x + \frac{d}{dx} \right) + \frac{1}{2}\, \mathbb{1} \tag{11a}$$

(Von jetzt an schreiben wir einfach x statt x_{op}). Eine analoge Rechnung, bei der die beiden Operatoren in anderer Reihenfolge stehen, liefert

$$H_{op} = \frac{1}{2} \left(x + \frac{d}{dx} \right) \left(x - \frac{d}{dx} \right) - \frac{1}{2}\, \mathbb{1} \tag{11b}$$

Wellenfunktionen und Energiespektrum

Wir wollen nun eine Methode untersuchen, wie man aus einer gegebenen Lösung ψ der Schrödingergleichung (7) eine neue Lösung φ, die aber zu einem anderen Eigenwert gehören kann, konstruiert. Zu diesem Zweck definieren wir die Funktion

$$\varphi(x) = \left(x - \frac{d}{dx}\right)\psi(x) \quad , \tag{12}$$

wenden auf diese den Hamiltonoperator in der Form (11a) an und benutzen anschließend (11b):

$$H_{op}\varphi = \frac{1}{2}\left(x - \frac{d}{dx}\right)\left(x + \frac{d}{dx}\right)\left(x - \frac{d}{dx}\right)\psi + \frac{1}{2}\left(x - \frac{d}{dx}\right)\psi$$

$$= \left(x - \frac{d}{dx}\right)\left\{\frac{1}{2}\left(x + \frac{d}{dx}\right)\left(x - \frac{d}{dx}\right) + \frac{1}{2}\mathbb{1}\right\}\psi = \left(x - \frac{d}{dx}\right)\left(H_{op} + \mathbb{1}\right)\psi$$

Da aber ψ als Lösung von (7) vorausgesetzt war, folgt

$$H_{op}\varphi = \left(x - \frac{d}{dx}\right)(E+1)\psi = (E+1)\varphi \tag{13}$$

Also ist φ in der Tat eine Lösung der Schrödingergleichung zu dem Eigenwert $E+1$. Die Anwendung des Operators $x-d/dx$ führt also von einer Lösung zu einer anderen, wobei der Eigenwert um 1 steigt. Durch sukzessive Anwendung auf eine spezielle Lösung, nämlich ψ_o, erhalten wir somit eine Folge von Lösungen

$$\boxed{\psi_n(x) = \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2/2}} \qquad (n = 0,1,\ldots) \tag{14}$$

Diese gehören nach dem oben bewiesenen zu den Energiewerten

$$\boxed{E_n = n + \frac{1}{2}} \tag{15}$$

Vollständigkeit der Lösungsmenge

Während der Operator $x-d/dx$ in der Leiter der Lösungen ψ_n (nach Definition) schrittweise von unten nach oben führt, gelangen wir mit Hilfe von $x+d/dx$ umgekehrt von oben nach unten. Zum Beweis berechnen wir unter Verwendung von (11b) und (15):

$$\left(x + \frac{d}{dx}\right)\psi_n = \left(x + \frac{d}{dx}\right)\left(x - \frac{d}{dx}\right)\psi_{n-1} = (2H_{op} + 1)\psi_{n-1}$$
$$= (2E_{n-1} + 1)\psi_{n-1}$$

(16) $$\left(x + \frac{d}{dx}\right)\psi_n = 2n\psi_{n-1} \qquad (n = 0,1,2...)$$

Nachdem wir mit den ψ_n eine ganze Reihe von Lösungen der Schrödingergleichung (auch Eigenfunktionen genannt) konstruiert haben, stellt sich die Frage, ob wir damit alle Lösungen gewonnen haben. Um dies zu beantworten, sei ψ eine beliebige Lösung von (7). Dann erhalten wir mit $(x+d/dx)^n\psi$ eine Folge von Lösungen, die zu den entsprechenden Eigenwerten E-n gehören $(n=0,1,2,...)$. Nun gibt es aber für negative Energiewerte keine Lösungen. (Dies beweist man, indem man (6) mit $\psi(x)$ multipliziert und integriert). Also muß die Reihe abbrechen, d.h. für ein bestimmtes $n(n\geq 0)$ ist $\varphi\equiv(x+d/dx)^n\psi\neq 0$, aber $(x+d/dx)\varphi=0$. Diese Differentialgleichung für φ besitzt die eindeutige Lösung $\varphi(x) = Ce^{-x^2/2}=C\psi_o(x)$. Schließlich lösen wir die Gleichung $(x+d/dx)^n\psi=C\psi_o$ nach ψ auf, indem wir den Operator $(x-d/dx)^n$ anwenden und n mal die Beziehung (11a) benutzen. Es folgt, daß ψ proportional zu ψ_n ist. Also haben wir mit den ψ_n aus Gl. (14) alle Lösungen der Schrödingergleichung gewonnen.

Normierung

Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Quantenmechanik fordert, daß die Wellenfunktionen auf 1 normiert sind. Dies ist bei unseren ψ_n noch nicht der Fall. Vielmehr berechnet sich die Norm zu

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2(x)\,dx = \int \left[\left(x - \frac{d}{dx}\right)\psi_{n-1}\right]\psi_n dx$$

Wir führen eine partielle Integration durch, wobei die Randterme verschwinden, weil $\psi_n(\pm\infty)=0$ ist. Außerdem benutzen wir Gl. (16):

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = \int \psi_{n-1}\left(x + \frac{d}{dx}\right)\psi_n dx = 2n\langle\psi_{n-1}|\psi_{n-1}\rangle$$

Die Lösung dieser Rekursionsformel ergibt sich unter Verwendung von $\int e^{-x^2}dx=\sqrt{\pi}$ zu:

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 2^n n!\langle\psi_o|\psi_o\rangle = 2^n n!\sqrt{\pi}$$

Die normierten Lösungen des harmonischen Oszillators lauten also:

$$(17) \qquad \varphi_n(x) = (2^n n!\sqrt{\pi})^{-1/2}\left(x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2/2}$$

Die Hermiteschen Polynome

Die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators sind durch (17) oder (14) zwar eindeutig beschrieben, jedoch liegen sie noch nicht als explizite Funktionen vor, sondern enthalten den Differentialoperator $x-d/dx$. Ein kleiner Beweis durch vollständige Induktion zeigt sofort, daß ψ_n ein Produkt aus der exp-Funktion $e^{-x^2/2}$ und einem Polynom $H_n(x)$ ist, welches Hermitesches Polynom vom Grad n genannt wird:

$$(18) \qquad \psi_n(x) = H_n(x)e^{-x^2/2}$$

Wendet man nämlich hierauf $x-d/dx$ an, dann wird der höchste Term in $H_n(x)$ gerade mit 2x multipliziert und liefert dadurch den höchsten Term in $H_{n+1}(x)$. Unsere Definition der Hermiteschen Polynome, die man auch

$$(19) \qquad H_n(x) = e^{x^2/2}\left(x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2/2}$$

schreiben kann, ist nur eine von mehreren Definitionsmöglichkeiten. In der mathematischen Literatur wird vorzugsweise

$$(20) \qquad H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

verwendet. Um die Äquivalenz beider Definitionen zu beweisen, differenzieren wir H_n (zur Unterscheidung benutzen wir für Def. (20) das Zeichen $\bar{H}_n$):

$$\frac{d}{dx} H_n = e^{x^2/2} \left(x + \frac{d}{dx}\right) \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2/2}$$

$$= e^{x^2/2} [2x - \left(x - \frac{d}{dx}\right)] \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2/2} = 2xH_n - H_{n+1}$$

$$\frac{d}{dx} \bar{H}_n = (-1)^n e^{x^2} \left(2x + \frac{d}{dx}\right) \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} = 2x\bar{H}_n - \bar{H}_{n+1}$$

Für beide Fälle erhalten wir also dieselbe Rekursionsformel

$$(21) \qquad H_{n+1} = 2xH_n - H'_n \qquad (n = 0,1,\ldots)$$

Wegen $H_o(x)=\bar{H}_o(x)=1$ ist daher der Beweis durchgeführt. Aus (21) berechnet man leicht die untersten H_n :

$$H_o = 1$$

$$H_1 = 2x$$

$$H_2 = 4x^2 - 2$$

$$H_3 = 8x^3 - 12x$$

$$H_4 = 16x^4 - 48x^2 + 12$$

Wie man sieht, enthalten die H_n abwechselnd nur gerade bzw. ungerade Potenzen. Der höchste Term von $H_n(x)$ ist $(2x)^n$. Die Hermiteschen Polynome erfüllen die Gleichung

$$(22) \qquad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(x) = e^{-s^2+2sx}$$

Die rechts stehende Funktion von s und x heißt "erzeugende Funktion der hermiteschen Polynome". Gl. (22) ist nichts anderes als die Taylorreihe dieser Funktion bezüglich der Variablen s . Die $H_n(x)$ treten als Entwicklungskoeffizienten auf und sind deshalb eindeutig durch die erzeugende Funktion bestimmt. Zum Beweis von (22) berechnen wir:

$$\frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-s^2+2sx} = e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(s-x)^2}$$

Da die Differentiation auf eine Funktion von $(s-x)$ wirkt, kann man $\partial/\partial s$ durch $-\partial/\partial x$ ersetzen:

$$= e^{x^2} (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n} e^{-(s-x)^2}$$

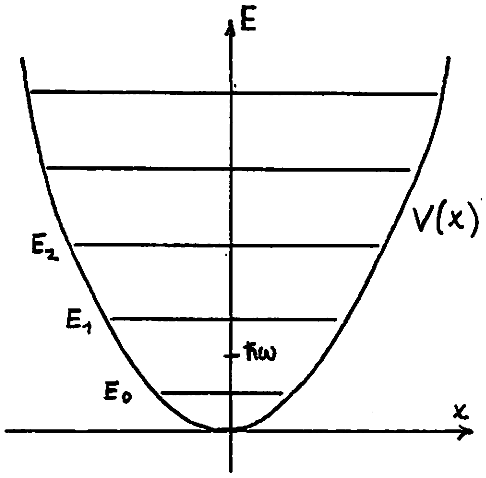
An der Stelle $s=0$ gilt daher:

$$\left.\frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-s^2+2sx}\right|_{s=0} = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} = H_n(x) \quad .$$

Damit ist Gl. (22) bewiesen.
Schließlich sei noch erwähnt, daß die Hermiteschen Polynome auch durch die Differentialgleichungen

$$(23) \qquad H_n'' - 2xH_n' + 2nH_n = 0$$

definiert werden können.



Kehren wir zu unserem schwingenden Massenpunkt zurück, so ergeben sich Energien und Wellenfunktionen, indem wir in (15) bzw. (17) und (18) wieder die dimensionsbehafteten Größen x und E einführen:

(24a) $$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

(24b) $$\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4} (2^n n!\sqrt{\pi})^{-1/2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{h}}\, x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

Der dreidimensionale harmonische Oszillator

Der räumliche harmonische Oszillator ist durch das Potential $V(\vec{x}) = \frac{1}{2} m\omega^2\vec{x}^2$ charakterisiert. In denselben Einheiten (5) für Länge und Energie lautet die Schrödingergleichung

(25) $$-\frac{1}{2}\Delta\psi(\vec{x}) + \frac{1}{2}\vec{x}^2\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}) \quad ,$$

zu deren Lösung wir den Separationsansatz

(26) $$\psi(\vec{x}) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_3(x_3)$$

machen.

Führt man die Separation durch, erhält man für jedes $\psi_k(x_k)$ die Schrödingergleichung (6) des linearen harmonischen Oszillators mit der Separationskonstante E_k als Eigenwert. Letztere stehen durch

(27) $$E = E_1 + E_2 + E_3$$

mit der Gesamtenergie in Beziehung.

Entsprechend den drei Raumachsen haben wir jetzt also drei Quantenzahlen, n_1, n_2, n_3, zu berücksichtigen, welche die "Energien" E_k vermöge Gl. (15) bestimmen und ebenso in den Indices der Wellenfunktionen (18) auftreten. Das Energiespektrum und die (nicht normierten) Wellenfunktionen lauten also:

(28) $$E_{n_1n_2n_3} = n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \qquad (n_k = 0,1,2,\ldots)$$

(29) $$\psi_{n_1n_2n_3}(\vec{x}) = H_{n_1}(x_1)H_{n_2}(x_2)H_{n_3}(x_3)e^{-\vec{x}^2/2}$$

Wie man sieht, gehören alle Lösungen $\psi_{n_1 n_2 n_3}$, für die $n_1+n_2+n_3 \equiv n$ fest bleibt, zu derselben Energie $n+3/2$. Man nennt diese Eigenschaft der Energieniveaus Entartung. Da für diese Funktionen deshalb auch die Differentialgleichung (25) dieselbe ist, sind beliebige Linearkombinationen ebenfalls Lösungen. Die $\psi_{n_1 n_1 n_3}$ stellen somit eine speziell gewählte Basis dar. Für die drei untersten Niveaus gibt es folgende Kombinationen:

E	n_1	n_2	n_3	Entartungsgrad
3/2	0	0	0	keine Entartung
	1	0	0	
5/2	0	1	0	3-fach
	0	0	1	
	2	0	0	
	1	1	0	
	1	0	1	
7/2	0	2	0	6-fach
	0	1	1	
	0	0	2	

Die Separation mit Kugelfunktionen

Wie man an Gl. (25) sieht, stellt der räumliche harmonische Oszillator ein kugelsymmetrisches Problem dar. Aus diesem Grunde ist auch eine Separation im radialen Teil und Winkelanteil angemessen. Hierzu verwenden wir die räumlichen Kugelfunktionen $P_{\ell m}(\vec{x})$, die als harmonische, homogene Polynome vom Grad ℓ definiert sind. Mit dem Ansatz

$$\psi(\vec{x}) = f(r) P_{\ell m}(\vec{x})$$

geht (25) über in

$$-(\Delta f)P_{\ell m} - 2\,\mathrm{grad}\,f\,\mathrm{grad}\,P_{\ell m} - f\Delta P_{\ell m} + r^2 f P_{\ell m} = 2EfP_{\ell m}$$

Als homogenes Polynom erfüllt $P_{\ell m}$ die Beziehung $\partial P_{\ell m}/\partial r = (\ell/r)P_{\ell m}$. Da ferner $P_{\ell m}$ harmonisch ist, folgt nach Division durch $P_{\ell m}$ und einsetzen von Δf die radiale Wellengleichung

(30) $$-f'' - \frac{2}{r}(\ell+1)f' + r^2 f = 2Ef$$

Diese Differentialgleichung besitzt für große Werte von r die Näherungslösung $e^{-r^2/2}$. Wir schreiben daher

(31) $$f(r) = v(r)e^{-r^2/2}$$

und machen für $v(r)$ einen Polynomansatz

(32) $$v(r) = \sum_{\nu=0}^{n} a_\nu r^\nu \quad .$$

Dieser führt zu der Rekursionsformel

(33) $$(\tfrac{1}{2}(\nu+1)+\ell+1)(\nu+2)a_{\nu+2} = (\nu+\ell+\tfrac{3}{2}-E)a_\nu \quad (\nu = 0,1,\ldots n-2)$$

und den Bedingungen

(34) $$a_1 = 0$$

(35) $$E = n + \ell + 3/2$$

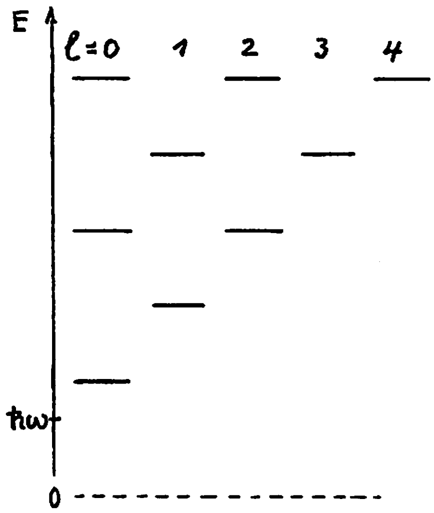
Wegen (33) sind neben a_1 auch alle weiteren ungeraden Koeffizienten gleich 0, sodaß der Grad des Polynoms $v(r)$ gerade sein muß:

(36) $$n = 2N \ .$$

Bezeichnen wir die Lösungspolynome mit $v_{\ell N}(r)$, dann lauten die gesamten Wellenfunktionen (mit χ statt ψ) und das Energiespektrum:

$$\boxed{\begin{aligned} &(37) \quad \chi_{N\ell m}(\vec{x}) = v_{\ell N}(r)\, e^{-r^2/2} P_{\ell m}(\vec{x}) \\ &(38) \quad E_{N\ell} = 2N + \ell + \frac{3}{2} \end{aligned}}$$

$(N = 0,1,2,\ldots \quad \ell = 0,1,2,\ldots \quad m = -\ell,\ldots \ell-1,\ell)$



Wie man sofort sieht, besteht auf jeden Fall eine Entartung im Hinblick auf die magnetische Quantenzahl m. Dies ist verständlich, da m die Orientierung der Wellenfunktion im Raum angibt und das Problem kugelsymmetrisch ist. Darüberhinaus gibt es noch eine gewisse Entartung bzgl. ℓ. Für die drei untersten Niveaus treten folgende Kombinationen auf:

E	N	ℓ	m	Entartungsgrad
3/2	0	0	0	keine Entartung
5/2	0	1	-1,0,1	3-fach
7/2	1	0	0	
	0	2	-2,-1,0,1,2	6-fach

Zu dem Energieniveau $E=7/2$ (als Beispiel) gehören also 6 linear unabhängige Wellenfunktionen $\chi_{N\ell m}$. Diese sind außer dem Faktor $e^{-r^2/2}$ anscheinend völlig verschieden von den entsprechenden 6 Lösungen $\psi_{n_1 n_2 n_3}$ aus Gl. (29), die aus den Hermiteschen Polynomen aufgebaut sind. Man kann aber im einzelnen nachprüfen, daß - wie es auch sein muß - das eine Funktionensystem sich durch das andere linear ausdrücken läßt. Die $\chi_{N\ell m}$ bilden also eine andere Basis des 6-dimensionalen Funktionenraumes, der die Lösungen zum Eigenwert 7/2 umfaßt. Entsprechendes gilt für die anderen Eigenwerte.