

Harmonischer Oszillator und 3d-Schrödingergleichung

Tutoren:

Jinming Lu, Konrad Schönleber

17.02.09

1 1D-Harmonischer Oszillator

Für die Entwicklung der Quantenmechanik spielte der harmonische Oszillator eine herausragende Rolle. Dieses spezielle Problem begegnet einem aus diesem Grund in praktisch allen Bereichen der Physik wieder, das Konzept von Photonen und Phononen z.B. lässt sich auf gekoppelte harmonische Oszillatoren zurückführen, und es lohnt sich es genau zu verstehen. Weiterhin sind viele der Rechenmethoden typisch für quantenmechanische Rechnungen.

Wir wollen den harmonischen Oszillator in dieser Vorlesung auf zwei Arten betrachten, einmal über die Wellenfunktion ($\Psi(x)$) und einmal abstrakt ($|\Psi\rangle$).

Wir werden den harmonischen Oszillator hier zunächst in einer Dimension untersuchen.

1.1 Betrachtung über $\Psi(x)$

Nach dem Korrespondenzprinzip setzen wir nun zunächst wie im klassischen Fall auch:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \quad \underbrace{\equiv}_{\text{Korrespondenz}} \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{1}{2}kx^2$$

Wir setzen nun als erstes die Eigenfrequenz $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ des Oszillators ein (bekannt aus dem klassischen Fall) und erhalten:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

Wir versuchen nun die Gleichung mit dimensionslosen Variablen zu schreiben, um die weitere Rechnung zu vereinfachen. Dazu setzen wir:

$$\epsilon := \frac{2E}{\hbar\omega} \quad \text{und} \quad y := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

Damit erhält die Schrödingergleichung eine einfachere Form:

$$\partial_y^2\Psi(y) + (\epsilon - y^2)\Psi(y) = 0$$

Diese Gleichung hat zwar eine recht einfache Gestalt, die Lösung ist trotzdem nicht ohne weiteres abzulesen. Wir verwenden nun einen Trick, indem wir

zunächst das asymptotische Verhalten für $y^2 \rightarrow \infty$ untersuchen und damit Informationen über die Struktur der Lösungen erhalten.

Im asymptotischen Fall ist der Term mit ϵ vernachlässigbar und wir erhalten:

$$\partial_y^2 \Psi_{as}(y) = y^2 \Psi_{as}(y)$$

Wir setzen mit einer Exponentialfunktion an und nutzen ein weiteres mal $y^2 \rightarrow \infty$ aus:

$$\Psi_{as}(y) = e^{f(y)} \Rightarrow \partial_y^2 \Psi_{as}(y) = e^{f(y)} f''(y) + (f'(y))^2 e^{f(y)}$$

Ist $f(y)$ nun ein beliebiges Polynom, so kann der Term $e^{f(y)} f''(y)$ vernachlässigt werden, da $f''(y)$ kleineren Grades als $(f'(y))^2$ ist. Man erkennt nun in unserem Fall:

$$f(y) = \pm \frac{1}{2} x^2$$

Wegen der Quadratintegrierbarkeit von $\Psi(y)$ ist das negative Vorzeichen das einzig physikalisch sinnvolle.

Um nun von der asymptotischen Lösung auf die eigentliche Lösung zu kommen wählen wir den Ansatz:

$$\Psi(y) = H(y) \Psi_{as}(y)$$

und erhalten somit:

$$\partial_y^2 H(y) - 2y \partial_y H(y) + (\epsilon - 1) H(y) = 0$$

Diese Gleichung lösen wir nun mit einem Potenzreihenansatz:

$$H(y) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m y^m$$

Mit diesem Ansatz erhalten wir für die geraden und die ungeraden Koeffizienten folgende Rekursionsformel:

$$a_{m+2} = \frac{2m - \epsilon + 1}{(m+1)(m+2)}$$

Man kann nun zeigen (etwas länglich), dass das asymptotische Verhalten von $\Psi(y)$ nur gewährleistet ist, wenn die Reihe irgendwo bei einem $m = N$ abbricht. Dies ist gewährleistet mit $\epsilon = 2N + 1$, also:

$$E = \frac{1}{2} \epsilon \hbar \omega = \hbar \omega \left(N + \frac{1}{2} \right)$$

Die Zustandseigenfunktionen sind entweder gerade oder ungerade (dies folgt aus der Symmetrie des Hamiltonoperators) und haben die Gestalt:

$$\Psi_{g,N}(y) = a_0 e^{-\frac{1}{2} y^2} \sum_{m=0}^N (-2)^m \frac{N!!}{(2m)!!(2m)!} y^{2m}$$

$$\Psi_{u,N}(y) = a_1 e^{-\frac{1}{2} y^2} \sum_{m=0}^N (-2)^m \frac{(N-1)!!}{(2m)!!(2m+1)!} y^{2m+1}$$

Die Werte für a_0 und a_1 ergeben sich aus der Normierungsbedingung.

$$a_0 = \pi^{-\frac{1}{4}} \quad \text{und} \quad a_1 = \sqrt{2} a_0$$

1.2 Betrachtung über $|\Psi\rangle$

In diesem Abschnitt sind wir nicht mehr an der (komplizierten) Gestalt der Eigenzustände im Ortsraum interessiert, sondern wollen Koordinatenunabhängige Aussagen über das System machen.

Wir beginnen wieder mit dem Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

Wir schreiben nun den Hamiltonoperator unter Beachtung von $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$ um in (Übung):

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega + \omega \underbrace{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega}} \right)}_{=: \hat{A}^\dagger} \underbrace{\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2}}\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega}} \right)}_{=: \hat{A}}$$

Wir nennen \hat{A} den Abwärtsoperator und \hat{A}^\dagger den Aufwärtsoperator. Diese Bezeichnungen werden im folgenden noch klarer.

Berechnung von Kommutatoren (das lohnt sich oft) ergibt (Übung):

$$[\hat{A}^\dagger, \hat{A}] = -\hbar$$

$$[\hat{H}, \hat{A}] = -\hbar\omega\hat{A}$$

$$[\hat{H}, \hat{A}^\dagger] = \hbar\omega\hat{A}^\dagger$$

Mit diesen Ergebnissen und der Eigenwertgleichung $\hat{H}|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle$ erhalten wir:

$$\hat{H}\hat{A}|\Psi_E\rangle = (E - \hbar\omega)\hat{A}|\Psi_E\rangle = (E - \hbar\omega)c|\Psi_{E-\hbar\omega}\rangle$$

$$\hat{H}\hat{A}^\dagger|\Psi_E\rangle = (E + \hbar\omega)\hat{A}^\dagger|\Psi_E\rangle = (E + \hbar\omega)d|\Psi_{E+\hbar\omega}\rangle$$

Wir sehen also, dass \hat{A} und \hat{A}^\dagger Eigenzustände zum Energieeigenwert E von \hat{H} in andere Eigenzustände zum Energieeigenwert $E \mp \hbar\omega$ von \hat{H} überführen.

Dies rechtfertigt nun auch die Benennung von \hat{A} und \hat{A}^\dagger .

Da nun der Hamiltonoperator in seiner ursprünglichen Schreibweise nur die Operatoren \hat{p}^2 und \hat{x}^2 enthält, sind alle seine Eigenwerte nicht negativ. Da nun der Absteigeoperator den Eigenwert immer um einen konstanten Wert verringert, gibt es einen Zustand minimaler Energie, den Grundzustand, den wir mit $|0\rangle$ bezeichnen wollen und für den gilt:

$$\hat{A}|0\rangle = 0$$

Wobei hier 0 den Nullvektor des Hilbertraumes bezeichnet.

Es folgt nun sofort:

$$\hat{H}|0\rangle = \left(\frac{1}{2}\hbar\omega + \omega\hat{A}^\dagger\hat{A}\right)|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle$$

Alle weiteren Energieeigenzustände finden wir über den Aufwärtsoperator \hat{A}^\dagger und nummerieren sie entsprechend der Anzahl der Anwendungen von \hat{A}^\dagger durch:

$$\hat{H}|n\rangle = C_n\hat{H}\hat{A}^{\dagger n}|0\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle$$

mit Normierungskonstanten (ohne Herleitung) $C_n = \frac{1}{(n!\hbar^n)^{1/2}}$.

Es war mit dieser Methode nicht nötig irgendeine Differentialgleichung zu lösen. Wir erhalten zwar nicht die konkrete Gestalt der Energieeigenzustände, erkennen aber dasselbe Energiespektrum und haben eine alternative Schreibweise für die Eigenzustände:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{\hat{A}^\dagger}{\sqrt{\hbar}} \right)^n |0\rangle$$

Wir können nun noch folgende Terme angeben:

$$A^\dagger |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{\hat{A}^\dagger}{\sqrt{\hbar}} \right)^n \hat{A}^\dagger |0\rangle = \sqrt{(n+1)\hbar} |n+1\rangle$$

und mit $AA^\dagger = A^\dagger A + [A, A^\dagger] = A^\dagger A + \hbar$:

$$A|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!\hbar^n}} \hat{A} \hat{A}^\dagger^n |0\rangle = \frac{n\hbar}{\sqrt{n!\hbar^n}} A^\dagger^{n-1} |0\rangle = \sqrt{n\hbar} |n-1\rangle$$

2 3D-Schrödingergleichung

Es ist unmittelbar klar, dass die überwiegende Anzahl physikalischer Systeme 3 Dimensionen besitzt. Aus diesem Grund wollen wir uns nun etwas näher der Schrödingergleichung in 3 Dimensionen zuwenden.

Diese hat die Gestalt:

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}} + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}, t)$$

Im stationären Fall bedeutet dies:

$$E\Psi(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}} + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r})$$

Speziell bei radialsymmetrischen Problemen, also im Fall $V(\vec{r}) \rightarrow V(r)$, (H-Atom, Zweiteilchenwechselwirkung, etc.) bietet es sich an Kugelkoordinaten zu verwenden.

Der Laplaceoperator hat in Kugelkoordinaten die folgende Form:

$$\Delta_{\vec{r}} = \frac{1}{r^2}\partial_r(r^2\partial_r) + \frac{1}{r^2\sin(\theta)}\partial_\theta(\sin(\theta)\partial_\theta) + \frac{1}{r^2\sin^2(\theta)}\partial_\phi^2 =: \Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\phi}$$

Wir setzen nun mit einem Separationsansatz an:

$$\Psi(\vec{r}) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

Damit erhalten wir in der stationären Schrödingergleichung:

$$ER(r)Y(\theta, \phi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(Y(\theta, \phi)\Delta_r R(r) + \frac{R(r)}{r^2}\Delta_{\theta,\phi} Y(\theta, \phi) \right) + V(r)R(r)Y(\theta, \phi)$$

Multiplikation mit $r^2/R(r)Y(\theta, \phi)$ liefert die gewünschte Variablenseparation (Beachte: Dies ist nur für radialsymmetrische Potentiale der Fall):

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{r^2}{R(r)} \Delta_r R(r) + r^2(E - V(r)) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{Y(\theta, \phi)} \Delta_{\theta, \phi} Y(\theta, \phi)$$

Nun ist die rechte Seite unabhängig von r und die linke Seite von θ und ϕ .

2.1 Einschub: Kugelflächenfunktionen

Um die Winkelabhängigkeit der Wellenfunktionen, die durch die 3D-Schrödingergleichung gegeben sind, für radialsymmetrische Potentiale zu bestimmen, verwenden wir die sog. Kugelflächenfunktionen.

Wir wollen uns nicht lange mit der Herleitung aufhalten, sondern lediglich motivieren wo sie ihre Anwendung finden.

Die Kugelflächenfunktionen sind tabelliert (und in Klausuren meist angegeben) und daher ist die Winkelabhängigkeit, wenn man weiß wo die Kugelflächenfunktionen einzusetzen sind, immer ein bereits gelöstes Problem.

Was wir wissen müssen, sind die folgenden Dinge:

1. Die Kugelflächenfunktionen sind Eigenfunktionen der Differentialgleichung, die dem Winkelanteil des Laplaceoperators zugrunde liegt.

$$\Delta_{\theta, \phi} Y_{lm}(\theta, \phi) = -l(l+1)Y_{lm}(\theta, \phi)$$

2. Der Parameter l ist eine natürliche Zahl und der Parameter m eine ganze Zahl mit $-l \leq m \leq l$

Nur zur Information hier die Gestalt der Kugelflächenfunktionen (das muss man nicht genau wissen):

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_{lm}(\cos(\theta)) e^{im\phi}$$

Mit den modifizierten Legendre-Polynomen:

$$P_{lm}(\cos(\theta)) = (\sin^2(\theta))^{\frac{|m|}{2}} \cdot \partial_{\cos(\theta)}^{|m|} P_l(\cos(\theta))$$

Hier nun noch die Angabe einiger Kugelflächenfunktionen:

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta) \quad ; \quad Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{i\phi} \quad ; \quad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) e^{-i\phi}$$

Auf die physikalische Bedeutung der Parameter l und m werden wir bei der Diskussion der Drehimpulse in der morgigen Vorlesung eingehen.

2.2 Radiale Schrödingergleichung

Indem wir den Winkelanteil der Schrödingergleichung mit Hilfe der Kugelflächenfunktionen elegant bewältigt haben, können wir uns nun der Gleichung für den Radialteil zuwenden.

Es ergibt sich:

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2}{2m} \frac{r^2}{R(r)} \Delta_r R(r) + r^2(E - V(r)) &= - \frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\frac{1}{Y(\theta, \phi)} \Delta_{\theta, \phi} Y(\theta, \phi)}_{-l(l+1)} \\ \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \frac{r^2}{R(r)} \Delta_r R(r) + r^2 \left(E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r R(r) + \left(E - V(r) - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \right) R(r) &= 0\end{aligned}$$

Es ist also durch die Winkelkoordinaten lediglich ein weiterer Term $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$ hinzu gekommen.

Man kann diesen Term als eine Modifikation des Potentials interpretieren und spricht von der sogenannten Zentrifugalbarriere.