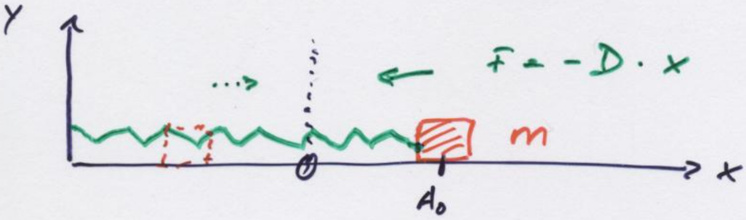
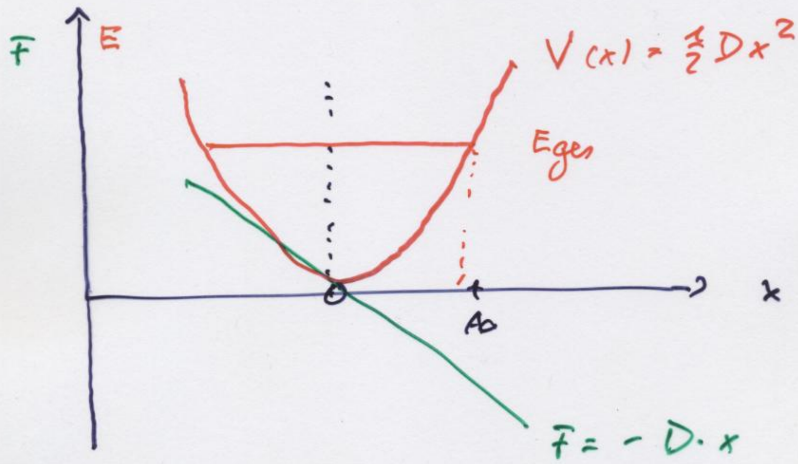
6.2.4 Harmonischer Oszillator





a. Klassisch (Federpendel)

- $m\ddot{x} = -Dx$

  $\Rightarrow x(t) = A_0 \cos\sqrt{\frac{D}{m}}\, t$

- $E_{Ges} = E_{k} + V(x)$

  $= \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} D x^2$

  $= \frac{1}{2} D A_0^2 \sin^2() + \frac{1}{2} D A_0^2 \cos^2()$

  $= D A_0^2 \cdot \frac{1}{2}$

6. QM (Bsp Moleküle, Atome im Kristall,..)

Schrödinger (stat.)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}Dx^2\right)u(x) = E\cdot u(x)$$

mit $\lambda = \frac{2mE}{\hbar^2}$,

$$\alpha^2 = \frac{mD}{\hbar^2} = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2u}{dx^2} + (\lambda - \alpha^2x^2)u = 0$$

i. Für $x \to \infty$: $\frac{d^2u}{dx^2} - \alpha^2x^2u = 0$

$$\Rightarrow u(x) = A_0 e^{-\alpha\frac{x^2}{2}}$$

$$= A_0 e^{-\frac{\sqrt{m\cdot D}}{2\hbar}x^2}$$

ii Für beliebige x :

Ansatz $u(x) = A_0 e^{-\alpha\frac{x^2}{2}}(a_0 + a_1x + a_2x^2 \ldots)$

Es muß gelten: $\int |u(x)|^2 dx = 1$

u(x) darf nicht beliebig anwachsen mit x.

Lösung: Hermitesche Polynome

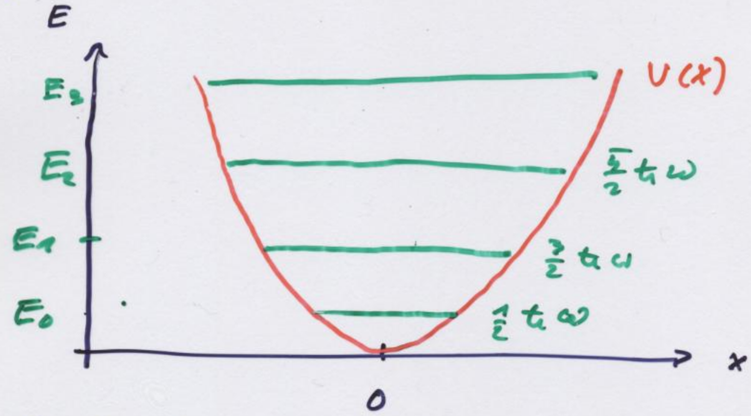
$$\Rightarrow \lambda_n = \alpha\,(2n+1)$$

Mit $\lambda_n = \frac{2m E_n}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\sqrt{mD}}{\hbar}$:

$$E_n = \hbar \sqrt{\frac{D}{m}}\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, \ldots$$

$$= \hbar \quad \omega$$

- Energie

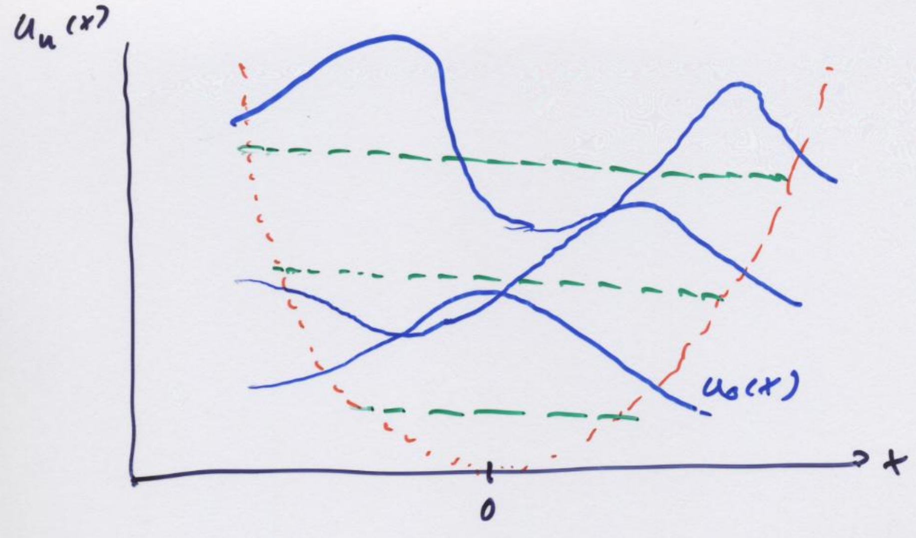


- Wellenfunktion

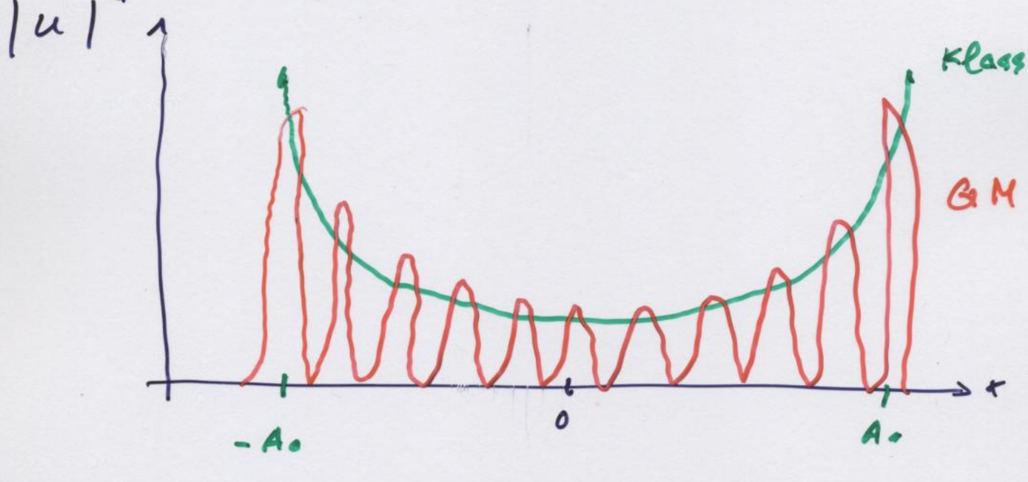
$$u_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \cdot e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$$

$$u_1(x) = \left(\frac{4\alpha^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \cdot x\, e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$$

$$u_n(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \cdot H_n\left(x \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$



$u_n(x)$
$u_0(x)$
x
0



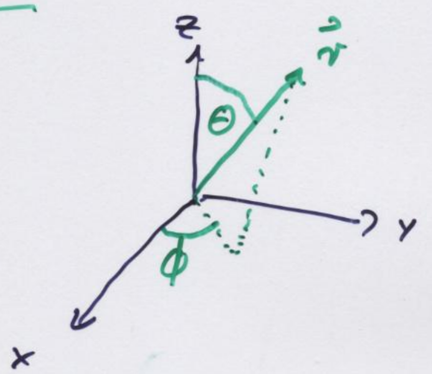
$|u|^2$
Klass.
QM
x
$-A_0$
0
A_0

7. Das Wasserstoffatom

7.1. Schrödingergleichung im Zentralfeld
$(V = V(r))$

- Nehme Kugelkoordinaten

$$x = r \cdot \sin\theta \cos\phi$$
$$y = r \cdot \sin\theta \cdot \sin\phi$$
$$z = r \cdot \cos\theta$$



- Berücksichtige, daß $m < \infty$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_2\right)\psi + V(\vec{r}_{12})\psi = E\psi$$

$$\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \equiv \vec{r}$$

μ oder M oder $m = \dfrac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$

- Auch: $\Delta = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial^2 z}$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$
$$+ \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

1. Lösungsansätze:

i) $\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\cdot Y(\theta,\phi)$

Separation möglich, da V nur von r abhängt.

$$= \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)\cdot Y + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(r)\right) R\cdot Y =$$

$$- \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)R - \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}R$$

$$\times \quad \frac{r^2}{R\cdot Y}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left(E - V(r)\right)$$

$$= -\frac{1}{Y}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right)$$

$$= \text{const.} = \ell(\ell+1)$$

ad hoc

ii) $Y(\theta,\phi) = T(\theta)\cdot F(\phi)$

Separation möglich, da Potential isotrop.

$$-\frac{1}{T\cdot F}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\,\frac{dT}{d\theta}\right)\cdot F + \frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{d^2}{d\phi^2}F\right)\cdot T\right\} = \ell(\ell+1)$$

$\times\ -\sin^2\theta$

$$\Rightarrow \sin^2\theta\left\{\frac{1}{T\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\,\frac{dT}{d\theta}\right) + \ell(\ell+1)\right\} = -\frac{1}{F}\frac{d^2F}{d\phi^2}$$

$$= \text{const.} = m^2$$

(ad hoc)

Ergebnis:

- $\dfrac{d^2F}{d\phi^2} + m^2 F = 0$ Azimuthalgleichung
- $\dfrac{1}{T\sin\theta}\dfrac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\,\dfrac{dT}{d\theta}\right) + \ell(\ell+1) - \dfrac{m^2}{\sin^2\theta} = 0$ Polargleichung
- $\dfrac{1}{r^2}\cdot\dfrac{1}{R}\dfrac{d}{dr}\left(r^2\dfrac{dR}{dr}\right) + \dfrac{2m}{\hbar^2}\left(E - V(r) - \dfrac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right) = 0$ Radialgleichung

zur Lösung:

Gleichungen:
- verschwinden für $r \to \infty$
- eindeutig auf der Kugel
  $\left[\begin{array}{l} F(\phi) = F(\phi + 2\pi) \\ T(\theta) = T(\theta + 2\pi) \end{array}\right]$
- quadratintegrierbar

(i) Azimutalgleichung:

Ansatz: $F_m = A \cdot e^{\pm i m \phi}$

Normierung: $\int_0^{2\pi} |F_m|^2 d\phi \overset{!}{=} 1$

$= |A|^2 \cdot \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi |A|^2$

$\rightarrow F_m = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i m \phi}$

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$

$\uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow$

Eindeutigkeit

(Bsp: für $m = 7{,}3$:
$e^{i \cdot 7{,}3 \phi} \neq e^{i\, 7{,}3 (\phi + 2\pi)}$
)

ii) Polargleichung :

Ansatz: Legendre-Polynome ($m=0$)

Zugeordnete L-P ($m \neq 0$)

$$T_l^m(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\; P_l^m(\cos\theta)$$

$$|m| \le l$$

Insgesamt:

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = T \cdot F$$

$$= \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\, N_l^m \cdot P_l^m \cdot e^{im\phi}}_{\text{Kugelflächenfunktion}}$$

unabhängig von $V(r)$

Voraussetzung:
- QM Wellen
- Quadratintegrierbar
- Eindeutigkeit
- Kugelsymmetrie