Übungsblatt VII Theoretische Physik D

Marco Schreck, Matrikelnummer: 1096937
Gruppe 5, Suresh Pereira

0.1 Übungsblatt VII

0.1.1 Aufgabe 1

a.)

Wir betrachten die Schrödinger-Gleichung:

$\hat{H}\Psi = E\Psi$

$\hat{p^2}2m\Psi = E\Psi$

Wir können den Hamilton-Operator zerlegen:

$\left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}\right)\Psi = E\Psi$

$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi = E\Psi$

Wir nehmen an, daß sich die Gesamtlösung als Produkt drei unabhängiger Lösungen schreiben läßt:

$\Psi_{ijk}(x, y, z) = \Psi_i(x)\Psi_j(y)\Psi_k(z)$

Diese Faktoren sollen nun genau die Lösungen des eindimensionalen Kasten darstellen:

$\Psi_i(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}n_1 x\right)$ für $n_1 = 1, 2, 3, \ldots$

$\Psi_j(y) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}n_2 y\right)$ für $n_2 = 1, 2, 3, \ldots$

$\Psi_k(z) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}n_3 z\right)$ für $n_3 = 1, 2, 3, \ldots$

Durch zweimaliges Ableiten erhalten wir dann:

$\Psi_i''(x) = -\frac{1}{\sqrt{a}}\frac{\pi^2}{a^2}n_1^2\sin\left(\frac{\pi}{a}n_1 x\right)$

$\Psi_j''(y) = -\frac{1}{\sqrt{a}}\frac{\pi^2}{a^2}n_2^2\sin\left(\frac{\pi}{a}n_2 y\right)$

$\Psi_k''(z) = -\frac{1}{\sqrt{a}}\frac{\pi^2}{a^2}n_3^2\sin\left(\frac{\pi}{a}n_3 z\right)$

Wir setzen den Separationansatz nun in die Schrödingergleichung ein und erhalten:

$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\pi^2}{a^2}n_1^2 + \frac{\pi^2}{a^2}n_2^2 + \frac{\pi^2}{a^2}n_3^2\right]\Psi_{ijk} = E\Psi_{ijk}$

Damit erhalten wir also folgende möglichen Energien:

$E_{n_1n_2n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right)$

b.)

Die Nullpunktsenergie lautet:

$$E_{111} = \frac{3}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}$$

Wir notieren uns die weiteren 6 Energienievaus:

- $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 6$:

$$\left.\begin{aligned} E_{211} &= 3\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} = 2E_1 \\ E_{112} &= 3\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} = 2E_1 \\ E_{121} &= 3\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} = 2E_1 \end{aligned}\right\}\text{3-fach entartet}$$

- $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 9$:

$$\left.\begin{aligned} E_{122} &= \frac{9}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} = 3E_1 \\ E_{212} &= \frac{9}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} = 3E_1 \\ E_{221} &= \frac{9}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} = 3E_1 \end{aligned}\right\}\text{3-fach entartet}$$

Die Energieeigenwerte $2E_1$ bzw. $3E_1$ sind jeweils dreifach entartet, was an der Symmetrie des Kubus liegt.

0.1.2 Aufgabe 2

a.)

Auch hier ist wieder die Schrödingergleichung zu lösen:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{m\omega}{2}(x^2 + y^2 + z^2)$$

Wir machen erneut folgenden Separationsansatz zur Lösung:

$$\Psi_{ijk}(x, y, z) = \Psi_i(x)\Psi_j(y)\Psi_k(z)$$

Durch Einsetzen erhalten wir:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\Psi_i(x)}{\partial x^2}\Psi_j(y)\Psi_k(z) + \frac{\partial^2\Psi_j(y)}{\partial y^2}\Psi_i(x)\Psi_k(z) + \frac{\partial^2\Psi_k(z)}{\partial z^2}\Psi_i(x)\Psi_j(y)\right] + \frac{m\omega}{2}\left(x^2 + y^2 + z^2\right)\Psi_i(x)\Psi_j(y)\Psi_k(z) =$$
$$= E\Psi_i(x)\Psi_j(y)\Psi_k(z)$$

Damit erhalten wir mit einer Division durch $\Psi_i(x)\Psi_j(y)\Psi_k(z)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\Psi_i(x)}\frac{\partial^2\Psi_i(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{\Psi_j(y)}\frac{\partial^2\Psi_j(y)}{\partial y^2} + \frac{1}{\Psi_k(z)}\frac{\partial^2\Psi_k(z)}{\partial z^2}\right] + \frac{m\omega}{2}\left(x^2 + y^2 + z^2\right) = E$$

Es folgen also drei separate eindimensionale Oszillatoren:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_i(x) + \frac{m\omega}{2}x^2\Psi_i(x) = E_1\Psi_i(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\Psi_j(y) + \frac{m\omega}{2}y^2\Psi_j(y) = E_2\Psi_j(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Psi_k(z)+\frac{m\omega}{2}z^2\Psi_k(z)=E_3\Psi_k(z)$$

$$E=E_1+E_2+E_3$$

Für die Energien gilt damit analog:

$$E_1=\hbar\omega_1\left(n_1+\frac{1}{2}\right),\ E_2=\hbar\omega_2\left(n_2+\frac{1}{2}\right),\ E_3=\hbar\omega_3\left(n_3+\frac{1}{2}\right)$$

$$E=\sum_{k=1}^{3}\hbar\omega_k\left(n_k+\frac{1}{2}\right)$$

Beim isotropen Oszillator gilt nun $\omega_1=\omega_2=\omega_3$, womit folgt:

$$E=\sum_{k=1}^{3}\hbar\omega\left(n_k+\frac{1}{2}\right)=\hbar\omega\cdot\left[\sum_{k=1}^{3}n_k+\sum_{k=1}^{3}\frac{1}{2}\right]=\hbar\omega\left(N+\frac{3}{2}\right)\ \text{ mit } N=n_1+n_2+n_3$$

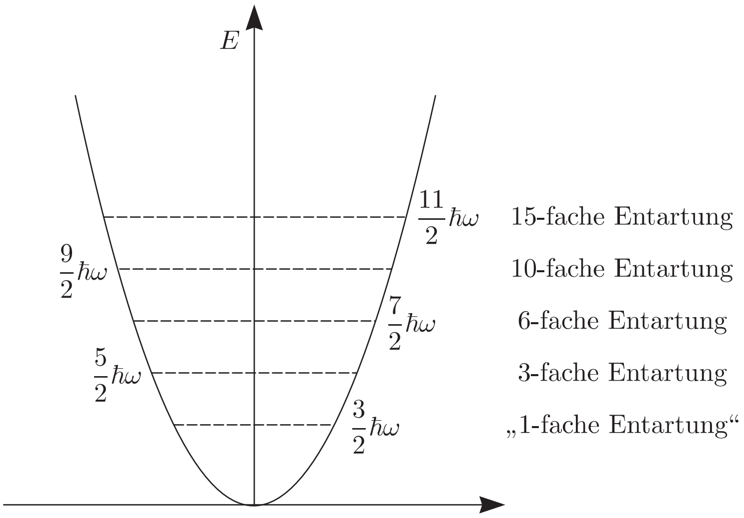
Wir berechnen nun abschließend die Anzahl der Möglichkeiten, die Zahl N durch n_1, n_2 und n_3 auszudrücken. n_1 besitze hierbei die größte Freiheit und durchlaufe die Werte $0, 1, 2, \ldots, N$. Damit ist n_2 aber schon eingeschränkt und kann nur noch $0, 1, 2, \ldots, N-n_1$ annehmen. Für n_3 gilt schließlich unter nochmaliger Einschränkung wegen n_2, daß die Werte $0, 1, 2, \ldots, N-n_1-n_2$ annehmbar sind. Wir summieren nun die Anzahl der Möglichkeiten für n_2 auf:

$$M=\sum_{n_1=0}^{N}(N-n_1+1)=\sum_{n_1=0}^{N}N-\sum_{n_1=0}^{N}+\sum_{n_1=0}^{N}1=N(N+1)-\frac{N}{2}(N+1)+N+1=N^2+N-\frac{N^2}{2}-\frac{N}{2}+N+1=$$
$$=\frac{N^2}{2}+\frac{3N}{2}+1=\frac{1}{2}\left(N^2+3N+2\right)=\boxed{\frac{1}{2}(N+1)(N+2)}$$

Der mittlere Term ergibt sich durch die Summe der ersten N natürlichen Zahlen. Das Endergebnis stellt nun die Anzahl der Möglichkeiten von n_2 und somit auch n_1 und n_3 dar.

Wir machen abschließend eine Tabelle:

n	Darstellungsmöglichkeiten				Entartung M	E_n in $\hbar\omega$
0	0, 0, 0				1	$\frac{3}{2}$
1	1, 0, 0					
	0, 1, 0				3	$\frac{5}{2}$
	0, 0, 1					
2	1, 1, 0	2, 0, 0				
	1, 0, 1	0, 2, 0			6	$\frac{7}{2}$
	0, 1, 1	0, 0, 2				
3	1, 1, 1	0, 1, 2	3, 0, 0			
		0, 2, 1	0, 3, 0			
		1, 0, 2	0, 0, 3		10	$\frac{9}{2}$
		2, 0, 1				
		1, 2, 0				
		2, 1, 0				
4	1, 1, 2	2, 2, 0	0, 1, 3	4, 0, 0		
	1, 2, 1	2, 0, 2	0, 3, 1	0, 4, 0		
	2, 1, 1	0, 2, 2	1, 3, 0	0, 0, 4	15	$\frac{11}{2}$
			1, 0, 3			
			3, 1, 0			
			3, 0, 1			



b.)

In der Aufgabe ist angegeben, daß man keine unnötigen Mühen mit den Normierungskonstanten der Kugelflächenfunktionen bzw. Hermite-Polynome machen soll. Deshalb arbeiten wir mit Proportionalitäten. Wir notieren uns die Wellenfunktionen der ersten beiden Energieniveaus:

$$\Psi_{100} \sim H_1(x)\exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) H_0(y)\exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) H_0(z)\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) = 2x\exp\left(-\frac{x^2+y^2+z^2}{2}\right) =$$
$$= 2x\exp\left(-\frac{r^2}{2}\right) \text{ mit } r^2 = x^2+y^2+z^2$$

Analog gilt dann:

$$\Psi_{010} \sim 2y\exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$$

$$\Psi_{001} \sim 2z\exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$$

Durch folgende geeignete Linearkombination von Ψ_{100} und Ψ_{010} können wir dann schreiben:

$$\Psi_{100} + \mathrm{i}\Psi_{010} \sim 2\,[x+\mathrm{i}y]\exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$$

Dies hat große Ähnlichkeit mit der Kugelflächenfunktion Y_{11} in kartesischen Koordinaten:

$$Y_{11} \sim \sin\vartheta\exp(\mathrm{i}\varphi) = \frac{x+\mathrm{i}y}{r}$$

Damit erhalten wir:

$$\boxed{\Psi_{100} + \mathrm{i}\Psi_{010} \sim 2r\exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)\cdot Y_{11}}$$

$\Psi_{100} + \mathrm{i}\Psi_{010}$ ist Eigenfunktion zu $\hat{H}$. Da Y_{11} Eigenfunktion sowohl zu $\hat{\vec{L}}^2$ als auch zu L_z ist, gilt dies auch für die Linarkombination $\Psi_{100} + \mathrm{i}\Psi_{010}$. Hierbei handelt es sich also um eine simultane Eigenfunktion von $\hat{H}$, $\hat{\vec{L}}^2$ und L_z. Der Zustand ist charakterisiert durch:

$$\boxed{n = l = m = 1}$$

Wir notieren uns außerdem die Wellenfunktionen des zweiten Energieniveaus:

$$\Psi_{200} = H_2(x)\exp\left(-\frac{x^2+y^2+z^2}{2}\right) \sim \left(x^2 - \frac{1}{2}\right)\exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$$

$$\Psi_{020} \sim \left(y^2 - \frac{1}{2}\right)\exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$$

$\Psi_{002} \sim \left(z^2 - \frac{1}{2}\right) \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$

$\Psi_{110} \sim xy \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$

$\Psi_{101} \sim xz \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$

$\Psi_{011} \sim yz \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$

Wir finden folgende geeignete Linearkombination:

$\Psi_{200}-\Psi_{020}+2\mathrm{i}\Psi_{110} \sim \left[x^2 - \frac{1}{2} - y^2 + \frac{1}{2} + 2\mathrm{i}xy\right] \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right) = \left[x^2 + 2\mathrm{i}xy - y^2\right] \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right) = [x+\mathrm{i}y]^2 \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$

Dies hat Ähnlichkeit mit der Kugelflächenfunktion Y_{22} in kartesischen Koordinaten:

$Y_{22} \sim \sin^2\vartheta \exp(2\mathrm{i}\varphi) = \frac{(x+\mathrm{i}y)^2}{r^2}$

Damit gilt also:

$\Psi_{200} - \Psi_{020} + 2\mathrm{i}\Psi_{110} \sim r^2 \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right) \cdot Y_{22}$

Daraus resultiert folgende Charakterisierung des Energieniveaus:

$\boxed{n = l = m = 2}$

c.)

Zuerst notieren wir uns wieder die relevanten Wellenfunktionen:

$\Psi_{111} \sim 8xyz \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$

$\Psi_{012} \sim (8z^2-4)y \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$, $\Psi_{021} \sim (8y^2-4)z \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$

$\Psi_{102} \sim (8z^2-4)x \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$, $\Psi_{201} \sim (8x^2-4)z \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$

$\Psi_{120} \sim (8y^2-4)x \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$, $\Psi_{210} \sim (8x^2-4)y \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$

$\Psi_{300} \sim (8x^3-12x) \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$, $\Psi_{030} \sim (8y^3-12y) \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$

$\Psi_{003} \sim (8z^3-12z) \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$

Wir schreiben $Y_{3,3}$ in kartesischen Koordinaten:

$$\begin{aligned}
Y_{33} &\sim \sin^3\vartheta \exp(3\mathrm{i}\varphi) = \sin^3\vartheta(\cos(3\varphi) + \mathrm{i}\sin(3\varphi)) = \sin^3\vartheta\left[4\cos^3\varphi - 3\cos\varphi + 3\mathrm{i}\sin\varphi - 4\mathrm{i}\sin^3\varphi\right] = \\
&= 4\frac{x^3}{r^3} - 4\mathrm{i}\frac{y^3}{r^3} - \frac{3\sin^2\vartheta \cdot x}{r} + \frac{3\mathrm{i}\cdot\sin^2\vartheta\cdot y}{r} = 4\frac{x^3}{r^3} - 4\mathrm{i}\frac{y^3}{r^3} - \frac{3x}{r} + \frac{3\cos^2\vartheta\cdot x}{r} + \frac{3\mathrm{i}y}{r} - \frac{3\mathrm{i}\cos\vartheta\cdot y}{r} = \\
&= 4\frac{x^3}{r^3} - 4\mathrm{i}\frac{y^3}{r^3} - \frac{3}{r}(x-\mathrm{i}y) + \frac{3z^2x}{r^3} - \frac{3\mathrm{i}z^2y}{r^3} = \frac{4}{r^3}(x^3-\mathrm{i}y^3) + \frac{3z^2}{r^3}(x-\mathrm{i}y) - \frac{3}{r}(x-\mathrm{i}y)
\end{aligned}$$

Durch geschickte Linearkombination obiger Wellenfunktionen erhält man:

$\Psi_{300} - \mathrm{i}\Psi_{030} + \Psi_{102} - \mathrm{i}\Psi_{012} = \left[8(x^3-\mathrm{i}y^3) + 8z^2(x-\mathrm{i}y) - 16(x-\mathrm{i}y)\right] \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$

Damit erhält man:

$\Psi_{300} - \mathrm{i}\Psi_{030} + \Psi_{102} - \mathrm{i}\Psi_{012} \sim \exp\left(-\frac{r^2}{2}\right) Y_{33}$

$\boxed{n = l = m = 3}$