QUANTENMECHANIK

David Gross, Johan Åberg

Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln

WS 24/25

Übungsblatt 13 **Abgabe: Samstag den 18. Januar um 24:00 Uhr**

1 Dreidimensionaler isotroper harmonischer Oszillator

Der isotrope[1] harmonische Oszillator entspricht dem Potential

$$V(\vec{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2, \quad r = \|\vec{x}\|.$$

Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung lautet somit

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\|\vec{x}\|^2\Big)\psi = E\psi. \tag{1}$$

Im Folgenden werden Sie zunächst die Eigenwerte bestimmen und dann die Eigenfunktionen in Form von Kugelflächenfunktionen und Radialfunktionen ausdrücken.

a) Beginnen Sie mit der Lösung des Eigenwertproblems, indem Sie die Tatsache ausnutzen, dass der dreidimensionale Oszillator als Summe von drei unabhängigen eindimensionalen Oszillatoren betrachtet werden kann. Machen Sie davon Gebrauch, indem Sie eine Trennung der Variablen durch den Ansatz $\psi(\vec{x}) = \psi^{(1)}(x_1)\psi^{(2)}(x_2)\psi^{(3)}(x_3)$ für die kartesischen Koordinaten $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ anwenden. *Verwenden Sie diesen Ansatz, um die Energie-Eigenwerte E_n und die entsprechenden Entartungen d_n zu finden.* Es ist vollkommen in Ordnung, die Eigenwerte eines eindimensionalen harmonischen Oszillators nachzuschlagen.

Hinweis: Erinnern Sie sich daran, dass die Entartung die Anzahl der linear unabhängigen Eigenfunktionen ist, die dem gleichen Eigenwert entsprechen. Um die Entartung zu berechnen, kann man sich genau n Bälle vorstellen, die über drei Kästchen verteilt werden sollen. Auf wie viele Arten kann dies geschehen? Angenommen, Sie legen n_1 Bälle in Kästchen 1. Auf wie viele Arten können die verbleibenden Bälle dann auf die Kästchen 2 und 3 verteilt werden?

(6 Punkte)

b) Der Hamiltonoperator ist sphärisch symmetrisch (rotationsinvariant). Daher sollte man dazu in der Lage sein, die Eigenfunktionen in Form von Kugelflächenfunktionen und Radialfunktionen auszudrücken. Prinzipiell könnten Sie über die Eigenfunktionen der eindimensionalen Oszillatoren in a) fortfahren. Dies würde jedoch die Berechnung einiger unangenehmer Integrale erfordern.[2] In Kugelkoordinaten nimmt (1) folgende Form an

$$\frac{1}{2m}\frac{1}{r^2}\boldsymbol{L}^2\psi(r,\theta,\phi) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}\psi(r,\theta,\phi) + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\psi(r,\theta,\phi) = E_n\psi(r,\theta,\phi), \tag{2}$$

wobei hier die Eigenwerte E_n verwendet werden, die Sie bereits in a) erhalten haben. Der Drehimpulsoperator $\boldsymbol{L}^2$ verwandelt sich in Kugelkoordinaten in ein Ungeheuer, aber für diesen

[1] Hier bedeutet „isotrop“, dass die Federkonstante in allen Richtungen gleich ist. Im Falle unterschiedlicher Federkonstanten würde man $V(\vec{x}) = \frac{1}{2}m(\omega_1^2 x_1^2 + \omega_2^2 x_2^2 + \omega_3^2 x_3^2)$ verwenden.

[2] Zumindest glaube ich, dass sie unangenehm zu berechnen wären, aber ehrlich gesagt habe ich es nicht versucht.

Kontext reicht es, dass die normalisierten Eigenfunktionen von $\boldsymbol{L}^2$ die Kugelflächenfunktionen $Y^m l$ sind, mit $\boldsymbol{L}^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$. *Machen Sie den Ansatz* $\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y_l^m(\theta,\phi)$ *und zeigen Sie, dass die Radialgleichung (die Gleichung für* $R(r)$*) in die Form eines effektiven Modells eines Teilchens, das sich in einem eindimensionalen Potential bewegt, gebracht werden kann:*

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + V\mathrm{eff}(r)\Big)u(r) = E_n u(r), \quad \text{für} \quad u(r) = rR(r). \tag{3}$$

Bestimmen Sie das effektive Potential V_{eff}. Hier sind E_n die Eigenwerte, die Sie in **a)** erhalten haben.

(3 Punkte)

c) Im Folgenden sollen die Eigenfunktionen der Radialgleichung (3) gefunden werden. Eine Strategie, dies zu tun, ist, die Gleichung in eine Form umzuschreiben, die bereits von jemand anderem gelöst wurde. Der Punkt ist, dass frühere Generationen von Physikern und Mathematikern wie fleißige Biber daran gearbeitet haben, „spezielle Funktionen" aus verschiedenen charakteristischen Differentialgleichungen zu entwickeln. Im Folgenden werden Sie diese Strategie anwenden und (3) als einen Spezialfall der generalisierten Laguerre-Gleichung umschreiben. Der erste Schritt besteht darin, den Variablenwechsel

$$x = \gamma r^2, \quad r = \sqrt{\frac{x}{\gamma}}, \quad \gamma = \frac{m\omega}{\hbar}$$

vorzunehmen und die Funktion

$$f(x) = u\Big(\sqrt{\frac{x}{\gamma}}\Big)$$

zu definieren. *Zeigen Sie, dass* (3) *umgeschrieben werden kann zu*

$$2x\frac{d^2}{dx^2}f(x) + \frac{d}{dx}f(x) - \frac{l(l+1)}{2}\frac{1}{x}f(x) - \frac{1}{2}xf(x) + (\frac{3}{2}+n)f(x) = 0. \tag{4}$$

(4 Punkte)

d) Als nächsten Schritt machen Sie den Ansatz

$$f(x) = x^{(l+1)/2}e^{-x/2}g(x).$$

Zeigen Sie, dass (4) *zu*

$$x\frac{d^2g}{dx^2} + \big((l+\frac{1}{2})+1-x\big)\frac{dg}{dx} + \frac{1}{2}(n-l)g(x) = 0 \tag{5}$$

wird.

(5 Punkte)

e) Jetzt könnten Sie fragen, warum man mit (6) zufriedener sein sollte als mit (2). Die Antwort ist, dass (6) zu jenen Klassen von Gleichungen gehört, deren Lösungen bereits bestimmt wurden, nämlich die der generalisierten Laguerre-Gleichungen

$$\Big(x\frac{d^2}{dx^2} + \big(\alpha+1-x\big)\frac{d}{dx} + k\Big)L_k^{(\alpha)}(x) = 0. \tag{6}$$

Für nicht-negative ganze Zahlen k sind die Lösungen die generalisierten Laguerre-Polynome $L_k^{(\alpha)}$. Mit $\alpha = l + \frac{1}{2}$ und $k = \frac{1}{2}(n-l)$ kann man also schließen, dass die Lösung von (6)

$g(x) = L^{(l+\frac{1}{2})}_{\frac{1}{2}(n-l)}(x)$ ist. Man könnte nun die generalisierten Laguerre-Polynome nachschlagen, wenn man möchte. Hier wird jedoch einfach $L^{(l+\frac{1}{2})}_{\frac{1}{2}(n-l)}$ als Symbol beibehalten. Was dennoch getan werden sollte, ist, die einzelnen Schritte nachzuvollziehen und die Lösungen $R(r)$ der Radialgleichung (3) zu bestimmen. *Drücken Sie die Lösungen $R_{n,l}$ in Bezug auf $L^{(l+\frac{1}{2})}_{\frac{1}{2}(n-l)}$ aus.* Nur um es klarzustellen: Sie müssen keine expliziten Ausdrücke für $L^{(l+\frac{1}{2})}_{\frac{1}{2}(n-l)}$ finden; es reicht aus, *$R_{n,l}$ in Bezug auf $L^{(l+\frac{1}{2})}_{\frac{1}{2}(n-l)}$* auszudrücken. Zudem müssen die Wellenfunktionen nicht normalisiert werden.

(2 Punkte)

Bemerkung: Streng genommen gibt es ein Lücke in dieser Argumentation. Wie oben erwähnt, muss k eine nicht-negative ganze Zahl sein. Es ist zwar bekannt, dass n und l ganze Zahlen sind, aber das reicht nicht aus, um zu garantieren, dass $\frac{1}{2}(n-l)$ eine nicht-negative ganze Zahl ist. Außerdem wird $n \geq l$ benötigt. Wenn n gerade ist, muss l ebenfalls gerade sein und wenn n ungerade ist, muss auch l ungerade sein. Prinzipiell müsste dies bewiesen werden. Dies wird hier jedoch übersprungen. Man könnte anmerken, dass (6) auch Lösungen haben kann, wenn k keine ganze Zahl ist. In diesen Fällen sind die Lösungen jedoch typischerweise keine Polynome.