

Fazit: wir haben folgende Schrödtingergleichung gelöst: $\hat{H}\Psi_n(x) = E_n \Psi_n(x)$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \Psi_n(x) = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \Psi_n(x) \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

mit Lösung $\Psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}$

H_n (Hermite - zur Energie $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$ (Polynome)). Dies sind alle möglichen Lösungen.

* Der harmonische Oszillator in 3 Dimensionen

Die Hamiltonfunktion und damit der Hamiltonoperator ist in 3D

wie folgt gegeben $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2} \sum_{i=1}^3 \omega_i^2 x_i^2 = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega_i^2 x_i^2 \right) \equiv \hat{H}_i$

da der Oszillator in die verschiedenen Raumrichtungen $x_i, i=1,2,3$ verschiedene Frequenzen ω_i haben kann (ggfs. nach geeigneter Koordination Wahl, Hauptachsen Wahl)

• für jede Richtung können wir separat

$$\hat{a}_{i0} = \sqrt{\frac{m\omega_i}{\hbar}} x_i + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m \omega_i}} p_i \quad \text{und entsp. } \hat{a}_j^\dagger \quad i, j = 1, 2, 3$$

definieren. Wegen $[\hat{x}_k, \hat{p}_l] = i\hbar \delta_{kl}$ erhalten wir

die Vertauschungsrelationen $\left[\hat{a}_{i0}, \hat{a}_{j0} \right] = 0 = \left[\hat{a}_{i0}^\dagger, \hat{a}_{j0}^\dagger \right]$
sowie $\left[\hat{a}_{i0}, \hat{a}_{j0}^\dagger \right] = \delta_{ij}$.

Der Hamilton op ergibt sich zu

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \hat{H}_i = \sum_{i=1}^3 \hbar\omega_i \left(\underbrace{\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i}_{N_i} + \frac{1}{2} \right) = \hbar \left(\omega_1 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \omega_2 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + \omega_3 \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_3 + \frac{3}{2} \right)$$

Grundzustandsenergie

Folglich läßt sich ein Separations- oder Produktansatz machen (siehe auch ebene Wellen in 3D, Ü 6.1 - dies gilt natürlich auch für 3D Systeme!)

$$|\vec{n}\rangle = |n_1\rangle_1 |n_2\rangle_2 |n_3\rangle_3 \quad \text{wobei}$$

$$H_i |n_i\rangle_i = \epsilon_i |n_i\rangle_i \quad \text{erfüllt f. } i=1,2,3.$$

$$\text{(bzw. } \langle \vec{x} | \vec{n} \rangle = \Psi_{\vec{n}}(\vec{x}) = \Psi_{n_1}^{(1)}(x_1) \Psi_{n_2}^{(2)}(x_2) \Psi_{n_3}^{(3)}(x_3) \text{)}$$

für jede Dimension $i=1,2,3$ läßt sich die Analyse wie in 1D durchführen, mit $H_i |n_i\rangle_i = \hbar \omega_i (n_i + \frac{1}{2}) |n_i\rangle_i$

$$a_i^+ |n_i\rangle_i = \sqrt{n_i+1} |n_i+1\rangle_i, \quad a_i |n_i\rangle_i = \sqrt{n_i} |n_i-1\rangle_i$$

wobei für alle 3 Dim. gelten muß, daß der Grundzustand $|\vec{0}\rangle$ durch alle 3 Absteige versenktbar wird:

$$\forall i=1,2,3 \quad \boxed{a_i |\vec{0}\rangle = 0} \quad \text{bzw. } \hat{a}_i |\vec{0}\rangle = 0$$

• jeder Zustand ist durch 3 unabhängige Quantenzahlen charakterisiert, d.h. wir schreiben

$$|\vec{n}\rangle = |n_1, n_2, n_3\rangle \quad \text{indies gilt}$$

$$\boxed{H |\vec{n}\rangle = (\hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3) |\vec{n}\rangle = \hbar (\omega_1 n_1 + \omega_2 n_2 + \omega_3 n_3 + \frac{3}{2}) |\vec{n}\rangle = E_{\vec{n}} |\vec{n}\rangle}$$

Die Auf- und Absteigeoperatoren erhöhen bzw. mindern die Energie in den jeweiligen n_i um $\pm \hbar \omega_i$, d.h. der allgemeinste angeregte Zustand

$$\text{Lambel } |\vec{n}\rangle = |n_1, n_2, n_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! n_3!}} (a_1^+)^{n_1} (a_2^+)^{n_2} (a_3^+)^{n_3} |\vec{0}\rangle$$

in der Ortsdarstellung gilt für den

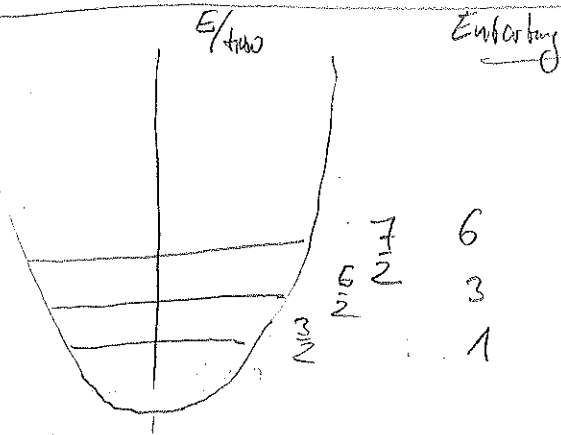
die Reihenfolge spielt hier keine Rolle da sie vertauschen

$$\text{Grundzustand } \langle \vec{x} | \vec{0} \rangle = \prod_{i=1}^3 \left(\frac{m \omega_i}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2} \frac{m \omega_i}{\hbar} x_i^2} = \prod_{i=1}^3 \Psi_0^{(i)}(x_i) \quad \text{mit } E_0 = \hbar \omega \frac{3}{2} \quad (> 1D)$$

$$\text{und entsprechend für } \langle \vec{x} | \vec{n} \rangle = \prod_{i=1}^3 \Psi_{n_i}^{(i)}(x_i)$$

Im Falle der Entartung mit $\omega_i = \omega \quad \forall i = 1, 2, 3$ gilt

$$E_n = \hbar\omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right)$$



bis auf den Grundzustand sind alle Zustände entartet, mit

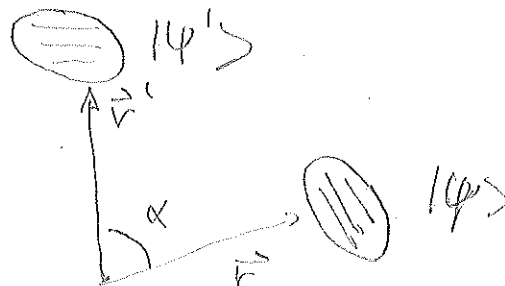
$$\text{Entartung } \frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

$$\text{z.B. } n=1 = \begin{cases} 1+0+0 \\ 0+1+1 \\ 0+0+1 \end{cases}$$

5 Rotationsymmetrie und Drehimpuls [Münster Kapitel 9]

Bisher haben wir vorwiegend eindimensionale Probleme gelöst, bzw. solche, wo die Ortsabhängigkeit in 3 Dimensionen komplett faktorisiert (Freies Teilchen in 3D, harmonische Oszillator in 3 Dim, S78.). Wir wenden uns nun 3Dim Problemen zu. In vielen Fällen gibt es Symmetrien, die uns die Lösung vereinfachen, z.B. wenn ein Zentralspotential vorliegt und damit eine Rotationsinvarianz:

Schematisch



Wir betrachten die zeitabhängige Schröd. und verlangen, daß aufgrund von Rotationsymmetrie ein Zustand $|\psi\rangle$ vor und nach einer Drehung $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle$ dieselbe Gleichung erfüllt:

Bsp Rotation R: $|\psi'\rangle = \hat{U}(R) |\psi\rangle$ (oder andere Symmetrie!)

• es sei der Zustand normiert, d.h. $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ vorher und deshalb $\langle \psi' | \psi' \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger(R) \hat{U}(R) |\psi\rangle = 1$ nachher.

d.h. $\hat{U}^\dagger(R) \hat{U}(R) = \mathbb{1}$ ist unitär: $\hat{U}^\dagger(R) = \hat{U}^{-1}(R)$

• Das betrachtete System ist symmetrisch wenn

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad \text{und} \quad i\hbar \frac{d}{dt} |\psi'\rangle = \hat{U}(R) i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle =$$

$$\stackrel{\hat{U}^\dagger(R)}{\Rightarrow} \text{es muß gelten } \boxed{\hat{H} = \hat{U}^\dagger(R) \hat{H} \hat{U}(R)} \quad = \hat{H} |\psi'\rangle = \hat{H} \hat{U}(R) |\psi\rangle \quad \text{gilt}$$

* Wir betrachten nun infinitesimal kleine Rotation (Symmetriebrüche)

$$\boxed{\hat{U}(R) \approx \mathbb{1} + i\epsilon \hat{G}_i} \quad \text{mit } |\epsilon| \ll 1 \text{ und Generator } \hat{G}_i$$

$$\Rightarrow \hat{U}^{-1}(R) \approx \mathbb{1} - i\epsilon \hat{G}_i \quad \text{da } \hat{U}(R) \hat{U}^{-1}(R) = \mathbb{1} + i\epsilon \hat{G}_i - i\epsilon \hat{G}_i + \mathcal{O}(\epsilon^2) = \mathbb{1} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

und wegen $\hat{U}^\dagger(R) = \hat{U}^{-1}(R) = \mathbb{1} - i\epsilon \hat{G}_i = \mathbb{1} - i\epsilon \hat{G}_i$

gilt daß \hat{G}_i hermitesch ist $\hat{G}_i = \hat{G}_i^\dagger$.

$$\Rightarrow \hat{H} = (\mathbb{1} - i\epsilon \hat{G}_i) \hat{H} (\mathbb{1} + i\epsilon \hat{G}_i) = \hat{H} + i\epsilon (\hat{H} \hat{G}_i - \hat{G}_i \hat{H}) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

d.h. es gilt daß $\boxed{[\hat{H}, \hat{G}_i] = 0}$.

Folglich können wir eine Basis wählen, die gleichzeitig zu \hat{H} und zu \hat{G}_i Eigenzustände bildet

* bevor wir überhaupt die Schrödi lösen kann ein solcher Vorfauscher der Symmetrieerzeugender Generatoren helfen, die Eigenzustände von \hat{H} zu klassifizieren!

5.1. Gruppen und Generatoren [Münster 9.1, (Fließband W 23)]

- mathematische Beschreibung von Symmetrien: Gruppen, Theorie

Gruppe G = Menge von Elementen $\{g_1, g_2, \dots\}$ (Nullstrich oder uml.)
mit Verknüpfung \circ die folgende Gruppenaxiome erfüllt

i) $g_1, g_2 \in G \Rightarrow g_1 \circ g_2 \in G$ abgeschlossenheit

ii) $g_1 \circ (g_2 \circ g_3) = (g_1 \circ g_2) \circ g_3$ Assoziativgesetz

iii) $e \circ g = g \circ e = g$ Existenz eines neutralen oder

iv) $\forall g \in G \exists g^{-1}: g^{-1} \circ g = g \circ g^{-1} = e$ Einselement e
Existenz eines inversen Elementes

* Konkretes Beispiel Drehungen im \mathbb{R}^3

diese werden durch eine Drehachse \vec{n} , mit $|\vec{n}| = 1$
und einem Drehwinkel α charakterisiert,

die Drehmatrix $R(\vec{n}, \alpha)$ erfüllt $\vec{v}^L = R(\vec{n}, \alpha) \vec{v}$
mit (i) $\alpha = 0$ $\underline{= \cos(\alpha) \vec{v} + [1 - \cos(\alpha)] (\vec{n} \cdot \vec{v}) \vec{n} + \sin(\alpha) \vec{n} \times \vec{v}}$

* wie wir leicht sehen erfüllen Drehungen die Gruppen eigenschaft,

i) $R(\vec{n}_2, \alpha_2) R(\vec{n}_1, \alpha_1)$ ist auch eine Drehung (aber nicht $\hat{=} R(\vec{n}_1, \alpha_1) R(\vec{n}_2, \alpha_2)$)

ii) klar

iii) $e = R(\vec{n}, \alpha = 0)$

iv) zu $R(\vec{n}, \alpha)$ gilt $R^{-1}(\vec{n}, \alpha) = R(\vec{n}, -\alpha)$

d.h. nicht-kommutative Gruppe

* wie oben bereits verwendet können wir die Drehungen im \mathbb{R}^3 als

3×3 Matrizen darstellen. Da Drehungen die Norm eines Vektors

erhalten, d.h. mit $|\vec{v}|^2 = v_i v_i = |R \vec{v}|^2 = \vec{v}^T R^T R \vec{v}$ sind die

R 's orthogonal, d.h. $\boxed{R^T R = \mathbb{1}}$. Wegen $\det R = 1$ heißt diese Gruppe $SO(3)$
(spezielle orth. Gruppe in \mathbb{R}^3)