

9. Übung

19) Dreidimensionaler harmonischer Oszillator

a) Schrödingergl. in Kugelkoordinaten:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \right] \psi(r, \vartheta, \varphi) = E \psi(r, \vartheta, \varphi)$$

Separationsansatz: $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \cdot Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$

mit $\hat{L}^2 Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \right] R(r) = E R(r)$$

mit $u(r) = r \cdot R(r)$

$$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \right] u(r) = E u(r) \quad (1)$$

• Verhalten für $r \rightarrow \infty$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \right] u(r) = 0$$

Lösung: $u_{\infty}(r) \sim e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2}$

$$\rightarrow u''(r) = r^2 \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2} - \frac{m\omega}{\hbar} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2}$$

vernachlässigbar für $r \rightarrow \infty$

• Verhalten für $r \rightarrow 0$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \right] u(r) = 0$$

Lösung: $u_0(r) = A r^{\ell+1} + B r^{-\ell}$

mit RB $u(0) = 0$ folgt $B = 0$

$$\rightarrow u_0(r) \sim r^{\ell+1}$$

$$\Rightarrow \text{allgemeiner Ansatz } u(r) = e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2} \cdot \underbrace{w(r)}_{\text{Potenzreihe}}$$

Berechnen der Ableitungen $u'(r)$ und $u''(r)$ und Einsetzen in (1) liefert:

$$w''(r) - 2r \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right) w'(r) - \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right) w(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} w(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2} w(r)$$

Substitution $\kappa = \sqrt{\frac{\hbar}{2mw}} x$

$$\Rightarrow w''(x) - x w'(x) + \underbrace{\left(\frac{E}{\hbar w} - \frac{1}{2} \right)}_{=\lambda} w(x) - \frac{l(l+1)}{x^2} w(x) = 0 \quad (2)$$

verallgemeinerte Potenzreihenansatz:

$$w(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+\alpha}$$

$$w'(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+\alpha) x^{n+\alpha-1}$$

$$w''(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+\alpha)(n+\alpha-1) x^{n+\alpha-2}$$

Einsetzen in (2) und Umformen liefert:

$$a_0 [\alpha(\alpha-1) - l(l+1)] x^{\alpha-2} + a_1 [(1+\alpha)\alpha - l(l+1)] x^{\alpha-1} + \sum_{n=0}^{\infty} [a_{n+2} (n+2+\alpha)(n+1+\alpha) - a_n (n+\alpha) + a_n \lambda - a_{n+2} l(l+1)] x^{n+\alpha} = 0$$

alle drei Terme müssen getrennt 0 ergeben:

$$\bullet x^{\alpha-2}: \quad \alpha(\alpha-1) = l(l+1) \quad (3)$$

$$\alpha = l+1 \frac{1}{2}$$

($\alpha_2 = -l$ wegen der RB $u(0) = 0$ nicht möglich)

$$\bullet x^{\alpha-1}: \quad \alpha(\alpha+1) = l(l+1) \quad (4)$$

$$\alpha = l$$

($\alpha_2 = -l-1$ wegen $u(0) = 0$ nicht möglich)

→ Es kann nicht gleichzeitig $\alpha = l+1$ und $\alpha = l$

⇒ entweder $a_0 = 0$ oder $a_1 = 0$

$$\bullet x^{n+\alpha}: \quad a_{n+2} = - \frac{\lambda - (n+\alpha)}{(n+1+\alpha)(n+2+\alpha) - l(l+1)} a_n$$

Rekursionsformel für die a_n

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{1}{n}$$

Das ist dasselbe asymptotische Verhalten wie das der Koeffizienten von $e^{x^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x^2)^n}{n!}$ ~~✗~~

(3)

Dies würde einem $R(r) \sim \frac{1}{r} e^{\frac{3m\omega}{2\hbar} r^2}$ entsprechen.
 \Rightarrow nicht normierbar! \Rightarrow Reihe muss abbrechen,
d.h. ab einem bestimmten \tilde{n} muss gelten

$$a_{\tilde{n}} = a_{\tilde{n}+1} = a_{\tilde{n}+2} = \dots = 0$$

$$\Rightarrow \lambda - (\tilde{n} + \alpha) = 0$$

Fallunterscheidung:

1) $a_1 = 0, a_0 \neq 0$

das bedeutet (siehe (3)) $\alpha = l + 1$

und $n \in \mathbb{N}_g$ (eine gerade Zahl da $a_{n+2} = \dots = a_n$)

$$\lambda - \tilde{n} - l - 1 = 0$$

$$\lambda = \tilde{n} + l + 1$$

$$\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} = \tilde{n} + l + 1$$

$$E = \hbar\omega \left(\tilde{n} + l + \frac{3}{2} \right) \quad (5)$$

2) $a_0 = 0, a_1 \neq 0$

das bedeutet (siehe (4)) $\alpha = l$

und $n \in \mathbb{N}_{ung}$ (eine ungerade Zahl)

$$\lambda - \tilde{n} - l = 0$$

um dieselbe Form wie unter (5) zu erhalten,

definieren wir $\tilde{n} = \tilde{m} + 1$ mit $\tilde{m} \in \mathbb{N}_g$

$$\Rightarrow \lambda - \tilde{m} - 1 - l = 0$$

$$E = \hbar\omega \left(\tilde{m} + l + \frac{3}{2} \right)$$

Definiere Hauptquantenzahl $N = \tilde{n} + l = \tilde{m} + l$

mit $\tilde{n}, \tilde{m} \in \mathbb{N}_g$, also $N = 2k + l$ mit $k \in \mathbb{N}$

$$\Rightarrow \boxed{E = \hbar\omega \left(N + \frac{3}{2} \right)}$$

b) $N=1 = \tilde{n} + l \quad \tilde{n} \in \mathbb{N}_0$

$\Rightarrow \tilde{n}=0, l=1$

$E = \hbar\omega \left(1 + \frac{3}{2}\right) = \frac{5}{2} \hbar\omega$

$a_{2n} = 0 \quad a_1 \neq 0$
 $a_{2n+1}, n \geq 1 = 0$
 $\Rightarrow w(x) = a_1 \cdot x^2$

• Eigenfunktionen / Eigenbasis des Unterraumes zu $N=1$:

$\psi_{01m}(\vec{r}) = R_{01}(r) \cdot Y_{1m}(\vartheta, \varphi) = \frac{u(r)}{r} \cdot Y_{1m}(\vartheta, \varphi) =$
 $= \frac{e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} w(r)}{r} \cdot Y_{1m}(\vartheta, \varphi) = \underbrace{a \cdot r \cdot e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}}_{\text{Normierung}} Y_{1m}(\vartheta, \varphi)$

$\psi_{01-1}(\vec{r}) = a r e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} Y_{1-1}(\vartheta, \varphi) \sim r e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \sin\vartheta e^{-i\varphi}$
 $\psi_{010}(\vec{r}) = a r e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} Y_{10}(\vartheta, \varphi) \sim r e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \cos\vartheta$
 $\psi_{011}(\vec{r}) = a r e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} Y_{11}(\vartheta, \varphi) \sim r e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \sin\vartheta e^{i\varphi}$

• Eigenfunktionen, die sich in der Form $f(x) \cdot g(y) \cdot h(z)$ schreiben lassen:

$\psi_{000} \sim e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2+z^2)} \underbrace{r \cos\vartheta}_z = \underbrace{e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}_{f(x)} \cdot \underbrace{e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}y^2}}_{g(y)} \cdot \underbrace{e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}z^2} \cdot z}_{h(z)}$

$\psi_{011} + \psi_{01-1} \sim e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \underbrace{r \sin\vartheta \cos\varphi}_x$

$\psi_{011} - \psi_{01-1} \sim e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \underbrace{r \sin\vartheta \sin\varphi}_y$

Diese Eigenfunktionen entsprechen und $|0\ 1\ 0\rangle$ aus Bsp. 16, UFT

$|0\ 0\ 1\rangle, |1\ 0\ 0\rangle$
(mit $N = n_x + n_y + n_z$)

c) $N=2 = \tilde{n} + l \quad \tilde{n} \in \mathbb{N}_0$

$\Rightarrow \tilde{n}=2$ und $l=0$ oder $\tilde{n}=0$ und $l=2$

1) $\tilde{n}=2, l=0$ $w(x) = a_0 x^{l+1} + a_2 x^{2+l+1} = a_0 x + a_2 x^3$

$a_{2n+1} = 0, a_0 \neq 0$ und $a_2 \neq 0, a_{2n}, n \geq 2 = 0$

$\psi_{200} = (a_0 + \tilde{a}_2 r^2) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2} Y_{00}(\vartheta, \varphi)$

$\tilde{a}_2 = a_2 \cdot \frac{2m\omega}{\hbar} \quad \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$$a_2 = - \frac{\lambda - \alpha}{(1+\alpha)(2+\alpha) - l(l+1)} a_0 \quad l=1 \quad \alpha = l+1 = 1$$

$$\lambda = \hbar^2 + \alpha = 2 + \alpha$$

$$a_2 = - \frac{2}{2 \cdot 3 - 0} a_0 = - \frac{1}{3} a_0$$

$$\psi_{200} = a_0 \left(1 - \frac{2}{3} \frac{m\omega r^2}{\hbar} \right) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \underbrace{Y_{00}}_{\text{bereits normiert}}$$

Normierung (wird später für die Berechnung der Koeffizienten der gesuchten Linearkombinationen benötigt):

$$a_0^2 \int_0^\infty dr r^2 \left(1 - \frac{2m\omega r^2}{3\hbar} \right)^2 e^{-\frac{m\omega r^2}{\hbar}} =$$

$$= a_0^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \int_0^\infty dx x^2 \left(1 - \frac{2}{3} x^2 \right)^2 e^{-x^2} = a_0^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{3/2} \frac{\sqrt{\pi}}{6} = 1$$

$$\Rightarrow a_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} \cdot \frac{\sqrt{6}}{\pi^{1/4}}$$

$$\psi_{200} = \underbrace{\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} \cdot \frac{1}{\pi} \right]^{1/4}}_A \sqrt{6} \left(\frac{\hbar}{m\omega} - \frac{2}{3} r^2 \right) e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} Y_{00}(\vartheta, \varphi)$$

2) $\hbar = 0, l = 2$

$$a_{2n+1} = 0, a_0 \neq 0, a_{2n}, n \geq 1 = 0 \Rightarrow w(x) = a_0 x^{l+1} = a_0 x^3$$

$$\left[\begin{array}{l} \psi_{02-1} \sim e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \cdot r^2 \sin \vartheta \cos \varphi e^{-i\varphi} \\ \psi_{021} \sim e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \cdot r^2 \sin \vartheta \sin \varphi e^{i\varphi} \\ \psi_{02-2} \sim e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \cdot r^2 \sin^2 \vartheta e^{-2i\varphi} \\ \psi_{022} \sim e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \cdot r^2 \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi} \\ \psi_{020} \sim e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \cdot r^2 (3 \cos^2 \vartheta - 1) \end{array} \right.$$

Normierung:

$$c^2 \int_0^\infty dr r^2 \cdot r^4 \cdot e^{-\frac{m\omega r^2}{\hbar}} = \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{7/2} \int_0^\infty dx x^6 e^{-x^2} = 1$$

$$\Rightarrow c = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{7/4} \cdot \frac{4}{\sqrt{15\pi}} = \underbrace{\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{3/4} \cdot \frac{1}{\pi} \right]^{7/4}}_A \cdot \frac{4}{\sqrt{15}}$$

- Eigenfunktionen, die sich in der Form $f(x) \cdot g(y) \cdot h(z)$ schreiben lassen:

$$\psi_{021} + \psi_{02-1} \sim e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \cdot \underbrace{r^2 \cos\varphi \sin\vartheta \cos\vartheta}_{x \cdot z} \sim \begin{matrix} |1 & 0 & 1\rangle \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ n_x & n_y & n_z \end{matrix}$$

$$\psi_{021} - \psi_{02-1} \sim e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \cdot \underbrace{r^2 \sin\varphi \sin\vartheta \cos\vartheta}_{y \cdot z} \sim |0 \ 1 \ 1\rangle$$

$$\psi_{022} - \psi_{02-2} \sim e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \cdot \underbrace{r^2 \sin(2\varphi) \sin^2\vartheta}_{x \cdot y} \sim |1 \ 1 \ 0\rangle$$

Die restlichen drei Eigenfunktionen $\psi_{022} + \psi_{02-2} \sim x^2 - y^2$, $\psi_{200} \sim \frac{\hbar}{m\omega} - \frac{2}{3}(x^2 + y^2 + z^2)$ und $\psi_{020} \sim 2z^2 - x^2 - y^2$ müssen so linear kombiniert werden, dass jeweils nur eines der drei Koordinatenquadrate x^2 , y^2 oder z^2 auftritt.

Zur expliziten Berechnung der Koeffizienten braucht es die korrekt normierten Eigenfunktionen

$$\psi_{020} = A \cdot \frac{4}{\sqrt{15}} \cdot e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (2z^2 - x^2 - y^2)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{022} + \psi_{02-2}) = A \cdot \frac{4}{\sqrt{15}} \cdot e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \sqrt{\frac{15}{16\pi}} (x^2 - y^2) \equiv \psi_{02|21}$$

$$\psi_{200} = A \sqrt{6} \cdot e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{\hbar}{m\omega} - \frac{2}{3}(x^2 + y^2 + z^2) \right)$$

mit $f(r) = \frac{A}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\frac{m\omega r^2}{2\hbar}}$ ergibt sich

$$|0 \ 0 \ 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (\sqrt{2} \psi_{020} - \psi_{200}) = -f(r) \left(\frac{\hbar}{2m\omega} - z^2 \right)$$

$$|0 \ 2 \ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (\psi_{020} + \sqrt{2} \psi_{200} + \sqrt{3} \psi_{02|21}) = -f(r) \left(\frac{\hbar}{2m\omega} - y^2 \right)$$

$$|2 \ 0 \ 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (\psi_{020} + \sqrt{2} \psi_{200} - \sqrt{3} \psi_{02|21}) = -f(r) \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar}{2m\omega} - x^2 \right)$$

20a) $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m^*} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$ mit $m^* = 0,067 m_e$

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

$\psi(x,y,z) = \psi_1(x) \cdot \psi_2(y) \cdot \psi_3(z)$

$E = E_x + E_y + E_z$

$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} \psi_1(x) = E_x \psi_1(x)$

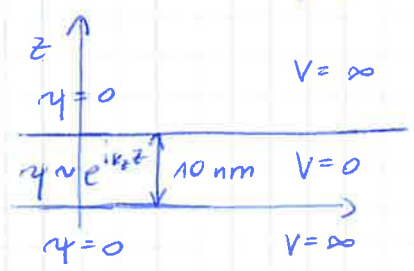
$\psi_1(x) \sim e^{ik_x x} \quad k_x = \frac{\sqrt{2m^* E_x}}{\hbar}$

$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dy^2} \psi_2(y) = E_y \psi_2(y)$

$\psi_2(y) \sim e^{ik_y y} \quad k_y = \frac{\sqrt{2m^* E_y}}{\hbar}$

$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \psi_3(z) = E_z \psi_3(z)$

$\psi_3(z) = a e^{ik_z z} = A \cos(k_z z) + B \sin(k_z z)$



RB: $\psi_3(0) = A = 0$

$\psi_3(10 \text{ nm}) = B \cdot \sin(k_z \cdot 10^{-8}) = 0$

$k_z \cdot 10^{-8} = n\pi$

$k_z = 10^8 n\pi$

$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \approx n^2 \cdot 0,056 \text{ eV}$

b) $\hat{H} = \sum_{i=1,2} t_\alpha (|i,\alpha\rangle \langle i+1,\alpha| + |i+1,\alpha\rangle \langle i,\alpha|)$

$\alpha \dots$ Orbitale d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}

$t_{xz} = t_{yz} = t_1 \quad t_{xy} = t_2$

$H = \begin{pmatrix} \langle 1,\alpha | & \langle 2,\alpha | & \langle 3,\alpha | \\ 0 & t & 0 \\ t & 0 & t \\ 0 & t & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |1,\alpha\rangle \\ |2,\alpha\rangle \\ |3,\alpha\rangle \end{matrix}$

$\begin{vmatrix} -\lambda & t & 0 \\ t & -\lambda & t \\ 0 & t & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda^3 + 2\lambda t^2 = 0$

$\lambda_1 = 0$

$\lambda^2 = 2t^2 \Rightarrow \lambda_{2,3} = \pm \sqrt{2} t$

Eigenwerte von \hat{H} :

$-\sqrt{2} t_1$	2x entartet
$-\sqrt{2} t_2$	1fach
0	3x entartet
$\sqrt{2} t_2$	1fach
$\sqrt{2} t_1$	2x entartet

c) $|i\rangle = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk e^{ikR_i} |k\rangle$ $R_i = ia$
mit a Abstand zwischen den Gitterplätzen

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_i t (|i\rangle \langle i+1| + |i+1\rangle \langle i|) = \\ &= \frac{a}{2\pi} \sum_i t \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_1 \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_2 \left[e^{i(k_1 R_i - k_2 R_{i+1})} |k_1\rangle \langle k_2| + e^{-i(k_1 R_i - k_2 R_{i+1})} |k_2\rangle \langle k_1| \right] = \\ &= t \left(\frac{a}{2\pi} \right)^2 \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_1 dk_2 \left[|k_1\rangle \langle k_2| e^{-ik_2 a} \sum_i e^{i(k_1 - k_2) R_i} + c.c. \right] \\ &= t \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_1 |k_1\rangle \langle k_1| \frac{e^{-ik_1 a} + e^{+ik_1 a}}{2 \cos(k_1 a)} \frac{2\pi}{a} \delta(k_1 - k_2) = \\ &= t \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk |k\rangle \langle k| 2 \cos(ka) \end{aligned}$$

$\Rightarrow \hat{H}$ ist diagonal in $|k\rangle \Rightarrow$ die Eigenwerte sind $2 \cos(ka)$ und die Eigenfunktionen $|k\rangle$ mit $-\pi/a \leq k \leq +\pi/a$

explizit: $\hat{H} |k\rangle = t \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk' |k'\rangle \underbrace{\langle k'|k\rangle}_{\frac{2\pi}{a} \delta(k-k')} 2 \cos(k'a) =$
 $= t \cdot 2 \cos ka |k\rangle$