

ÜS 7 - Harmonischer Oszillator

Differentialgleichung zweiter Ordnung

7.2 Differentialgleichungen höherer Ordnung

DGLs höherer Ordnung sind nur dann immer lösbar, wenn es eine lineare DGL mit konst. Koeff. sind und der ggf. inhomogene Teil (Störfunktion $s(x)$) zu einer Auswahl von Funktionen passt.

7.2.2 Homogene und partikuläre Lösung

Die homogene Lösung $y_h(x)$ ist über den Euler-Ansatz ermittelbar ($s(x)$ null setzen). Dabei wird $y^{(n)}(x)$ mit λ^n ersetzt, wobei das charakteristische Polynom entsteht. Jede Nullstelle dieses ist interpretierbar als Fundamentalslösung, wobei gilt:

Ordnung der DGL \equiv Anzahl Fundamentalslösungen

Vorgehen: Homogene Lösung nach Euler-Ansatz

1. Charakteristisches Polynom ($y^{(n)}(x) \Rightarrow \lambda^n$).
2. Nullstellen des Polynoms mit ggf. Polynomdiv.
3. Nullstellen $\lambda_1, \lambda_2, \dots \Rightarrow$ Fundamentalslösungen:

a) Unterschiedliche reelle Nullstellen $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$:

$$y(x) = A e^{\lambda_1 x} + B e^{\lambda_2 x} + C e^{\lambda_3 x}$$

b) Mehrfache Nullstellen $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda$:

$$y(x) = x^0 A e^{\lambda x} + x^1 A e^{\lambda x} + x^2 A e^{\lambda x}$$

Die Summanden werden sukzessive mit höheren Potenzen von x multipliziert.

c) Komplexe Nullstellen (in kompl. konj. Paaren) $\lambda = a \pm ib$:

$$y(x) = A e^{ax} \cos(bx) + B e^{ax} \sin(bx)$$

4. $y(x) =$ Summe der Fundamentalslösungen

Beispiel: Homogene DGL höherer Ordnung

$$y''' - 2y'' - y' + 2y = 0$$

$$\text{Euler} \Rightarrow \lambda^3 - 2\lambda^2 - \lambda + 2 = 0$$

$$\text{Polyn. div.} \Rightarrow \text{geratene Nullstelle: } \lambda_1 = 1$$

$$(\lambda^3 - 2\lambda^2 - \lambda + 2) : (\lambda - 1) = \lambda^2 - \lambda - 2$$

$$\lambda^2 - \lambda - 2 \stackrel{!}{=} 0$$

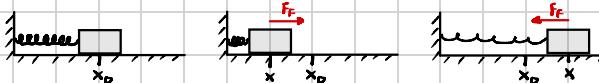
$$\lambda_{2,3} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + 2}$$

$$= \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{9}{4}} = \frac{1}{2} \pm \frac{3}{2} \quad \begin{cases} \lambda_2 = 2 \\ \lambda_3 = -3 \end{cases}$$

$$y(x) = A e^x + B e^{-x} + C e^{2x}$$

Der harmonische Oszillator

Der harmonische Oszillator ist ein idealisiertes Modell der klassischen Physik, welches wir häufig nutzen um Bindungsschwingungen in Molekülen zu erklären. Eine Masse m ist an einer Feder befestigt und oszilliertreibungsfrei nach einer Auslenkung aus der Gleichgewichtslage, auf Grund der rückstellenden Kraft \vec{F}_F nach dem Hook'schen Gesetz.



$$F_F = -kx \quad k = \text{Kraftkonstante Feder}$$

$$\text{Bewegungsgleichung: } F = m\ddot{x} = -kx \Rightarrow \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{k}{m}x = 0 \quad \omega^2 \equiv \frac{k}{m} \quad \frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0$$

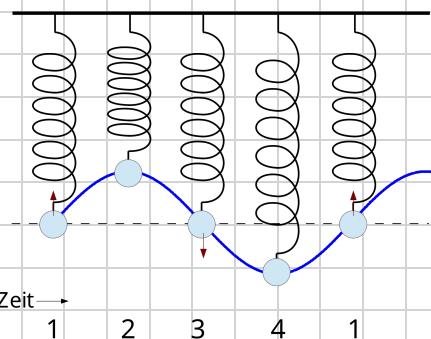
$$\text{Charakteristisches Polynom: } \chi(\lambda) = \lambda^2 + \omega_0^2 = \lambda^2 + \omega^2 \quad \lambda = \pm i\omega \quad x(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t)$$

$$\text{Anfangsbedingung: } x(t=0) = x_0 \quad x(0) = A \cos(0) + B \sin(0) = A = x_0 \quad x(t) = x_0 + B \sin(\omega t)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = 2\pi\nu \quad \text{Kreisfrequenz}$$

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi\nu \quad \text{Periode}$$

$$\nu = \frac{1}{T} = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{frequenz}$$



Die Schrödinger-Gleichung ist eine Gleichung der verallgemeinerten Mechanik und kann quantenmechanische Systeme beschreiben. Die zeitabhängige SG ist postuliert noch die Zeitpropagation eines Systems. Die zeitunabhängige SG betrachtet ein System zu genau einem Zeitpunkt.

$$\text{zeitabhängige SG: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad \text{zeitunabhängige SG: } \hat{H} \psi = E \psi$$

i : imaginäre Einheit ($i = \sqrt{-1}$)

\hbar : reduziertes Planck'sches Wirkungsquantum

$\frac{\partial}{\partial t}$: partielle Ableitung nach der Zeit

\hat{H} : Hamilton-Operator

ψ : Wellenfunktion

Operatoren sind mathematische Anweisungen, die wir auf Funktionen anwenden.

Beispielsweise: "Multipliziere mit s ", "Addiere mit z ", "Leite einmal ab" etc.

Wenn Operatoren Funktionen nur skalieren ist ψ eine Eigenfunktion des Operators und der reelle Skaliierungsfaktor $\lambda \in \mathbb{R}$ ist der Eigenwert

$$\text{Eigenwertgleichung: } \hat{O} f(x) = \lambda f(x)$$

$\begin{matrix} \uparrow & \nearrow \\ \text{Operator} & \text{Eigenfunktion} \end{matrix}$

$$\hat{O} = \frac{d}{dx}$$

$$f(x) = x^2$$

$$g(x) = e^{2x}$$

$$\hat{O}f = \frac{d}{dx}[x^2] = 2x \quad \text{kein Eigenfunktion}$$

$$\hat{O}g = \frac{d}{dx}[e^{2x}] = 2e^{2x} \quad \text{Eigenfunktion mit } \lambda = 2 \in \mathbb{R}$$

Die Schrödinger-Gleichung ist eine Verallgemeinerung der klassischen Mechanik nach dem **Hamilton-Formalismus** (Vorl.: Allgemeine Mechanik, 3. Sem. Physik). Der Hamiltonoperator \hat{H} enthält alle Informationen eines QM-Systems (Postulat 1). Wendet man \hat{H} auf die zugehörige Wellenfunktion ψ eines Systems an, dann kommt die Energie des Systems multipliziert mit ψ heraus (Eigenwertgleichung: $\hat{H}\psi = E\psi$).

$$\Rightarrow \hat{H} \equiv \text{"Energieoperator"} \quad \hat{H} = \hat{T}_{\text{kin}} + \hat{V}_{\text{pot}} = \hat{T} + \hat{V}$$

In PC 0 haben wir nur 2 Energiebeiträge. Die potentielle Energie des Systems wird durch die Aufgabe / Problem / QM-System gegeben. Der kinetische Energieoperator \hat{T}_{kin} ist immer gleich für Systeme mit einem Teilchen.

$$1D: \quad \hat{T}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

$$2D: \quad \hat{T}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)$$

$$3D: \quad \hat{T}_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

$$\text{Laplace-Operator} \quad \Delta = \nabla^2 = \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \quad N = \dim(\text{System})$$

Einfach die Summe aller zweifachen Ortsableitungen

$$\Delta_{1D} = \frac{d^2}{dx^2}$$

$$\Delta_{2D} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

$$\Delta_{3D} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$