Theoretische Physik III
- Quantenmechanik (SS 2010) -

Übungsblatt 4 & 5 ($40 + \pi$ Punkte)[1]
Ausgabe 11.05.10 – Abgabe 27.05.10 – Besprechung n.V.
Aufgaben mit Sternchen sind Klausurisomorph

▷ **Aufgabe 1 (Bahndrehimpuls)*** (6 Punkte)

Es seien $\hat{\vec{q}}$ der Orts- und $\hat{\vec{p}}$ der Impulsoperator eines Teilchens. Die kartesischen Komponenten, daran sei erinnert, genügen den kanonischen Vertauschungsrelationen

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{1}$$

Der Bahndrehimpuls, auch daran sei erinnert, ist in der klassischen Mechanik definiert $\vec{\ell} := \vec{q} \times \vec{p}$. Quantisierung wie üblich, also Hüte drauf, und evlt Kommutator (1) beachten, kurz

$$\hat{\vec{\ell}} := \hat{\vec{q}} \times \hat{\vec{p}}. \tag{2}$$

(a) Bestätigen Sie, dass die kartesischen Komponenten des Bahndrehimpulses der Drehimpulsalgebra genügen,

$$\left[\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y\right] = i\hbar\hat{\ell}_z\,, \qquad \text{und } xyz \text{ zyklisch}\,. \tag{3}$$

(b) Bestätigen Sie, dass in der Ortsdarstellung in Kugelkoordinaten r, ϑ, φ

$$\hat{\ell}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{4}$$

▷ **Aufgabe 2 (Radial-Zentrifugal Zerlegung)** (4 Punkte)

In rotationssymmetrischen Problemen wird die kinetische Energie $\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ häufig in einen Radial- und einen Zentrifugalanteil zerlegt. Der Bahndrehimpuls $\vec{\ell} = \vec{r} \times \vec{p}$ quadriert $\vec{\ell}^2 = \vec{r}^2\vec{p}^2 - (\vec{r}\cdot\vec{p})^2$, ergo $\vec{p}^2 = p_r^2 + \vec{\ell}^2/r^2$ worin $p_r = \frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}$ der Radialimpuls. Quantenmechanisch ist hier zwar die Nichtvertauschbarkeit von Ort und Impuls zu beachten, das Resultat liest sich aber wie in der klassichen Mechanik

$$\hat{\vec{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\vec{\ell}}^2}{r^2}\,. \tag{5}$$

Nur der *Radialimpuls* $\hat{p}_r$ ist nicht, wie man naiv erwarten würde $\propto \frac{\partial}{\partial r}$, sondern

$$\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\,. \tag{6}$$

Er genügt einer Vertauschungsrelation

$$[r, \hat{p}_r] = i\hbar \tag{7}$$

und ist selbstadjungiert auf $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}_+, r^2dr)$.

Beweisen Sie Gl. (5)–(7).

[1]Aufgaben mit transzendenter Punktezahl sind fakultative Nüsse. Nüsse sind bekanntlich nahrhaft ...

▷ **Aufgabe 3 (Erhaltungsgrößen im Zweikörperproblem)*** (10 Punkte)

Gegeben zwei Punktteilchen im physikalischen Raum, dem $\mathbb{R}^3$, deren kanonisch konjugierten Koordinaten(-Vektoren) und Impulse mit $\hat{\vec{q}}^{(i)}$, $\hat{\vec{p}}^{(i)}$, $i = 1, 2$ bezeichnet seien. Die fundamentalen Kommutatoren lauten

$$\left[\hat{q}_i^{(\alpha)}, \hat{p}_j^{(\beta)}\right] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij} \tag{8}$$

alle anderen Kommutatoren Null.

(a) In der Orstdarstellung für jedes der beiden Teilchen ist die quantenmechanische Wellenfunktion des zwei-Teilchen Systems zu jedem Zeitpunkt t eine komplexwertige Funktion von 6 Variablen, $\Psi(x^{(1)}, y^{(1)}, \ldots, z^{(2)})$. Welche physikalische Bedeutung hat diese Wellenfunktion im Bezug auf eine Ortsmessung der beiden Teilchen?

Beschränkt man sich auf konservative Wechselwirkung (kein Vektorpotential), und nimmt an, daß keine externen Kräfte wirken, lautet der Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^{(1)2}}{2m^{(1)}} + \frac{\hat{\vec{p}}^{(2)2}}{2m^{(2)}} + V(|\hat{\vec{q}}^{(1)} - \hat{\vec{q}}^{(2)}|)\,. \tag{9}$$

Die Funktion V bezeichnet hier das *Wechselwirkungspotential* der beiden Teilchen. Die ausschließliche Abhängigkeit des WW-Potentials vom Abstand der beiden Teilchen respektieren die Homogenität und Isotropie des Raumes und die Homogenität der Zeit.

(b) Homogenität des Raumes besagt, daß kein Raumpunkt ausgezeichnet ist. Mathematisch ist die Wechselwirkung invariant unter einer Verschiebung des Koordinatenursprungs, sie hängt nur von den Relativkoordinaten $\hat{\vec{q}}$ ab,

$$\hat{\vec{q}} := \hat{\vec{q}}^{(1)} - \hat{\vec{q}}^{(2)} \tag{10}$$

nicht aber von den Schwerpunktskoordinaten,

$$\hat{\vec{Q}} := \frac{m^{(1)}\hat{\vec{q}}^{(1)} + m^{(2)}\hat{\vec{q}}^{(2)}}{m^{(1)} + m^{(2)}} \tag{11}$$

Welche Erhaltungsgrößen sind mit dieser Invarianz verknüpft?

<u>Hinweis:</u> Denken Sie an alle Erhaltungsgrößen eines freien Teilchens. Bezeichnen Sie, falls er Ihnen über den Weg läuft,

$$\hat{\vec{P}} := \hat{\vec{p}}^{(1)} + \hat{\vec{p}}^{(2)} \tag{12}$$

den Gesamtimpuls (= Schwerpunktimpuls) des Zwei-Teilchensystems, und

$$\hat{\vec{\ell}}_{\mathrm{S}} := \hat{\vec{Q}} \times \hat{\vec{P}} \tag{13}$$

den Drehimpuls der Schwerpunktbewegung (*nicht* Gesamtdrehimpuls!).

(c) Zeigen Sie, dass

$$\hat{\vec{p}} = \frac{m^{(2)}\hat{\vec{p}}^{(1)} - m^{(1)}\hat{\vec{p}}^{(2)}}{m^{(1)} + m^{(2)}} \tag{14}$$

den zu $\hat{\vec{q}}$ kanonisch konjugierten Impuls der Relativbewegung bezeichnet. Ist die Transformation $\left\{\hat{\vec{q}}^{(1)}, \hat{\vec{p}}^{(1)}, \hat{\vec{q}}^{(2)}, \hat{\vec{p}}^{(2)}\right\} \to \left\{\hat{\vec{Q}}, \hat{\vec{P}}, \hat{\vec{q}}, \hat{\vec{p}}\right\}$ kanonisch?

(d) Zeigen Sie, dass der Gesamtdrehimpuls $\hat{\vec{L}} \equiv \hat{\vec{\ell}}^{(1)} + \hat{\vec{\ell}}^{(2)}$ sich in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten ausdrückt

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{Q}} \times \hat{\vec{P}} + \hat{\vec{q}} \times \hat{\vec{p}} \tag{15}$$

(e) Zeigen Sie, dass sich in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten der Hamiltonoperator ausdrückt (1 Punkt)

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\vec{q}}|)\,. \tag{16}$$

(f) Isotropie des Raumes besagt, daß keine Richtung im Raum ausgezeichnet ist. Mathematisch ist das WW-Potential daher invariant unter Drehungen des Radiusvektors $\hat{\vec{q}}$. Welche Erhaltungsgröße ist mit dieser Invarianz verknpft?

(g) Homogenität der Zeit besagt, daß kein Zeitpunkt ausgezeichnet ist. Mathematisch hängt das WW-Potential daher nicht explizit von der Zeit ab. Welche Erhaltungsgröße der Relativbewegung ist mit dieser Invarianz verknüpft?

(h) Zeigen Sie: Die allgemeine Lösung der zwei-Teilchen Schrödingergleichung lässt sich als lineare Superposition von Produktvektoren der Gestalt $|\Phi(t)\rangle \otimes |\psi(t)\rangle$ darstellen, wobei die Faktoren $|\Phi(t)\rangle$ bzw. $|\psi(t)\rangle$ Vektoren im Hilbertraum der Schwerpunkts- bzw. Relativbewegung sind. Insbesondere gilt aufgrund der Separierbarkeit des Hamiltonoperators, vgl. (16),

$$i\hbar|\dot{\Phi(t)}\rangle = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M}|\Phi(t)\rangle\,, \tag{17}$$

$$i\hbar|\dot{\psi(t)}\rangle = \left[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(|\hat{\vec{q}}|)\right]|\psi(t)\rangle\,. \tag{18}$$

▷ **Aufgabe 4 (Legendre-Polynome)** (8 Punkte)

Zur Erinnerung: Ein Legendrepolynom $P_\ell(z)$ ist ein Polynom ℓ-ter Ordnung, $P_l(z) = \sum_n a_n z^n$, dessen Koeffizienten rekursiv definiert sind, $a_{n+2} = \frac{n(n+1)-\ell(\ell+1)}{(n+1)(n+2)} a_n$, und dessen Funktionswert an der Stelle $z = 1$ vereinbarungsgemäß $P_\ell(1) = 1$. Aus der Vorlesung wissen Sie schon, dass P_ℓ der Legendreschen Differentialgleichung genügt,

$$(1 - z^2)P_\ell''(z) - 2zP_\ell'(z) + \ell(\ell+1)P_\ell(z) = 0\,. \tag{19}$$

Beweisen Sie bitte die *Formel von Rodriguez*,

$$P_\ell(z) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{dz^\ell}(z^2 - 1)^\ell\,, \tag{20}$$

die *Orthogonalitätsrelation*

$$\int_{-1}^{1} P_\ell(x) P_{\ell'}(x) dx = \frac{1}{\ell + \frac{1}{2}} \delta_{\ell\ell'} \tag{21}$$

und die *Rekursionsformeln*

$$\begin{aligned} P'_{n+1} - P'_{n-1} - (2n+1)P_n &= 0\,, & (22)\\ (n+1)P_{n+1} - (2n+1)zP_n + nP_{n-1} &= 0\,, & (23)\\ P'_{n+1} - zP'_n - (n+1)P_n &= 0\,, & (24)\\ (z^2-1)P'_n - nzP_n + nP_{n-1}\,. & & (25) \end{aligned}$$

▷ **Aufgabe 5 (Auswahlregeln)*** (6 Punkte)

Die Wechselwirkung (engl. interaction) eines Atoms mit dem elektrischen Feld wird in der sog Dipolnäherung beschrieben

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\vec{E} \cdot \hat{\vec{D}} \tag{26}$$

worin $\hat{\vec{D}}$ der Vektoroperator Dipolmoment, im Falle atomaren Wasserstoffs $\hat{\vec{D}} = -e\hat{\vec{q}}$.

Für atomaren Wasserstoff (ohne Spin): Berechnen Sie die Matrixelemente $\langle nlm|\hat{H}_{\text{int}}|n'l'm'\rangle$. Überzeugen Sie sich insbesondere von den sog *Auswahlregeln*

$$\Delta l \equiv l - l' = \pm 1\,, \qquad \Delta m \equiv m - m' = 0, \pm 1\,. \tag{27}$$

Auswahlregeln spielen eine prominente Rolle bei der Wechselwirkung von Materie (= Haufen von Atomen) mit Licht. Lesen Sie aus den Auswahlregeln eine Hypothese für den Eigendrehimpuls (=Spin) des Photons ab.

▷ **Aufgabe 6 (Messwertverteilungen Wasserstoffelektron)** (6 Punkte)

In der Vorlesung haben Sie die Wellenfunktion des Grundzustandes eines Wasserstoffelektrons (ohne Spin) kennengelernt,

$$\psi_{1,0,0}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}\,, \tag{28}$$

wobei a_0 Bohr'scher Radius.

(a) Wie lautete die Wahrscheinlichkeitsdichte, bei einer Ortsmessung das Elektron im Abstand a vom Kern zu finden? Skizzieren Sie die Wahrscheinlichkeitsdichte!

(b) Zeigen Sie, daß die Wellenfunktion des Grundzustandes in der Impulsdarstellung durch

$$\tilde{\psi}(\vec{k}) = \frac{2^{3/2}}{\pi} \frac{1}{a_0^{5/2}} \frac{1}{\left(k^2 + a_0^{-2}\right)^2} \tag{29}$$

gegeben ist.

(c) Wie lautet die Wahrscheinlichkeitsdichte, bei einer Messung des Relativimpulses $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ die Wellenzahl $k = |\vec{k}|$ zu finden?