Hinweis

Die vorliegende Lösung wurde im Rahmen der jeweiligen Lehrveranstaltung an der Universität Bonn erstellt. Sofern im oberen Teil der ersten Seite oder auf der unten angegebenen Webseite nicht anders vermerkt, wurde diese Lösung von mir, Marvin Zanke, alleine angefertigt und eingereicht. Bei allem in einer anderen Farbe als dem üblichen Blau handelt es sich in der Regel um Korrekturen von mir oder des Tutors. Für mehr Informationen und meine gesamten Unterlagen, siehe:
https://www.physics-and-stuff.com/

Ich erhebe keinen Anspruch auf Richtigkeit und Vollständigkeit der vorliegenden Lösungen! Dies gilt ebenso für obengenannte Korrekturen.

M.CCo! 16 **Theoretische Physik III Blatt 8**

Marvin Zanke
Florian Streckwitz
Till Wenzigmann

H1) $$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_{x_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_{x_2} \quad , \quad |\vec{x}_1 - \vec{x}_2| = \text{const.}$$

Woher kommt der Hamiltonian überhaupt? Also wie kommt man allgemein auf einen Hamilton-op für ein Problem? ↪ besprochen

a) Wir transformieren hier ins Schwerpunktsystem / mit Relativkoordinaten

In diesem System gilt wie in der Mechanik:

$$\vec{R} = \frac{m_1\vec{x}_1 + m_2\vec{x}_2}{m_1+m_2} \checkmark \quad , \quad \vec{r} = \vec{x}_2 - \vec{x}_1 \checkmark$$

Nun müssen wir den Laplace in dieses System umrechnen.

Mit $\Delta_{x_1} := \frac{\partial^2}{\partial (x_1^1)^2} + \frac{\partial^2}{\partial (x_1^2)^2} + \frac{\partial^2}{\partial (x_1^3)^2}$, wobei x_1^i die i-te Komp. bezeichnet

folgt dann für die zweiten Ableitungen: Wäre alles etwas kürzer mit Summenkonvention: $\Delta_{x_1} = \frac{\partial}{\partial x_1^i}\frac{\partial}{\partial x_1^i}$

$$\frac{\partial}{\partial x_1^1} = \frac{\partial R_1}{\partial x_1^1}\frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{\partial r_1}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial r_1} = \frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial R_1} - \frac{\partial}{\partial r_1}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial (x_1^1)^2} = \frac{\partial}{\partial x_1^1}\left(\frac{\partial}{\partial x_1^1}\right) = \left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial R_1} - \frac{\partial}{\partial r_1}\right)\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial R_1} - \frac{\partial}{\partial r_1}\right)$$

$$= \frac{m_1^2}{(m_1+m_2)^2}\frac{\partial^2}{\partial R_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} - \frac{2m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial R_1}\frac{\partial}{\partial r_1} \checkmark$$

Analog folgt dann:

$$\frac{\partial^2}{\partial (x_1^2)^2} = \frac{m_1^2}{(m_1+m_2)^2}\frac{\partial^2}{\partial R_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} - \frac{2m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial R_2}\frac{\partial}{\partial r_2} \checkmark$$

$$\frac{\partial^2}{\partial (x_1^3)^2} = \frac{m_1^2}{(m_1+m_2)^2}\frac{\partial}{\partial R_3^2}\frac{\partial^2}{\partial r_3^2} - \frac{2m_1}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial R_3}\frac{\partial}{\partial r_3} \checkmark$$

Mit $\Delta_{x_2} := \frac{\partial}{\partial (x_2^1)^2} + \frac{\partial^2}{\partial (x_2^2)^2} + \frac{\partial^2}{\partial (x_2^3)^2}$ folgt ähnlich:

$$\frac{\partial}{\partial (x_2^1)} = \frac{\partial R_1}{\partial x_2^1}\frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{\partial r_1}{\partial x_2^1}\frac{\partial}{\partial r_1} = \frac{m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{\partial}{\partial r_1} \checkmark$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial (x_2^1)^2} = \frac{m_2^2}{(m_1+m_2)^2}\frac{\partial^2}{\partial R_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{2m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial R_1}\frac{\partial}{\partial r_1} \checkmark$$

Analog: $$\frac{\partial^2}{\partial (x_2^2)^2} = \frac{m_2^2}{(m_1+m_2)^2}\frac{\partial^2}{\partial R_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{2m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial R_2}\frac{\partial}{\partial r_2} \checkmark$$

$$\frac{\partial^2}{\partial (x_2^3)^2} = \frac{m_2^2}{(m_1+m_2)^2}\frac{\partial^2}{\partial R_3^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} + \frac{2m_2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial R_3}\frac{\partial}{\partial r_3} \checkmark$$

sehr gut

1a	1b	1c	2a	2b	2c	2d	Σ
6/6	3/3	3/3	2/2	2/2	2/2	2/2	20/20

Dann folgt mit dem angegebenen Hamiltonian sofort:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta x_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta x_2$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_1}\left(\frac{m_1^2}{(m_1+m_2)^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial R_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial R_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial R_3^2}\right)+\left(\frac{\partial^2}{\partial r_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial r_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial r_3^2}\right)\right.$$

$$\left. -\frac{2m_1}{m_1+m_2}\left(\frac{\partial}{\partial r_1}\frac{\partial}{\partial R_1}+\frac{\partial}{\partial r_2}\frac{\partial}{\partial R_2}+\frac{\partial}{\partial r_3}\frac{\partial}{\partial R_3}\right)\right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2}\left(\frac{m_2^2}{(m_1+m_2)^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial R_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial R_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial R_3^2}\right)+\left(\frac{\partial^2}{\partial r_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial r_2^2}+\frac{\partial^2}{\partial r_3^2}\right)\right.$$

$$\left. +\frac{2m_2}{m_1+m_2}\left(\frac{\partial}{\partial r_1}\frac{\partial}{\partial R_1}+\frac{\partial}{\partial r_2}\frac{\partial}{\partial R_2}+\frac{\partial}{\partial r_3}\frac{\partial}{\partial R_3}\right)\right)$$

Def. Δ_R und Δ_r und Summenkonvention

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_1}\left\{\frac{m_1^2}{(m_1+m_2)^2}\Delta_R+\Delta_r\right\}-\frac{\hbar^2}{2m_2}\left\{\frac{m_2^2}{(m_1+m_2)^2}\Delta_R+\Delta_r\right\}$$

$$+\frac{\hbar^2}{2}\cdot\frac{2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial r_i}\frac{\partial}{\partial R_i}-\frac{\hbar^2}{2}\frac{2}{m_1+m_2}\frac{\partial}{\partial r_i}\frac{\partial}{\partial R_i}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2}\Delta_R\left\{\frac{m_1}{(m_1+m_2)^2}+\frac{m_2}{(m_1+m_2)^2}\right\}-\frac{\hbar^2}{2}\Delta_r\left\{\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right\}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2}\Delta_R\left\{\frac{1}{m_1+m_2}\right\}-\frac{\hbar^2}{2}\Delta_r\,\frac{m_2+m_1}{m_1m_2}$$

Def. M und μ

$$= -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r \checkmark$$

6/6

GROSSE FRAGE: WARUM GEHT DAS NICHT MIT DER INVERSEN TRANSFORMATION?

Aus $\vec{R}$ und $\vec{r}$ folgt auch direkt: (*)

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{x}_1 + m_2 \vec{x}_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1 \vec{x}_1 + m_2 (\vec{r} + \vec{x}_1)}{m_1 + m_2} = \frac{\vec{x}_1 (m_1 + m_2) + m_2 \vec{r}}{m_1 + m_2}$$

$$= \vec{x}_1 + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{r} \Leftrightarrow \vec{x}_1 = \vec{R} - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{r}$$

Außerdem: $\vec{x}_2 = \vec{r} + x_1 = \vec{R} - \frac{m_2}{m_1+m_2} \vec{r} + \vec{r} = \vec{R} + \vec{r} \left(1 - \frac{m_2}{m_1+m_2}\right)$

$$= \vec{R} + \vec{r} \frac{m_1}{m_1 + m_2}$$

Nun folgt ganz analog wie eben: Satz der inversen Fkt.

$$\frac{\partial}{\partial x_1^1} = \frac{\partial R_1}{\partial x_1^1} \frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{\partial r_1}{\partial x_1^1} \frac{\partial}{\partial r_1} = \frac{1}{\frac{\partial x_1^1}{\partial R_1}} \frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{1}{\frac{\partial x_1^1}{\partial r_1}} \frac{\partial}{\partial r_1}$$

$$= \frac{\partial}{\partial R_1} - \frac{m_1 + m_2}{m_2} \frac{\partial}{\partial r_1}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial (x_1^1)^2} = \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} + \frac{(m_1+m_2)^2}{m_2^2} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} - \frac{2(m_1+m_2)}{m_2} \frac{\partial}{\partial R_1} \frac{\partial}{\partial r_1}$$

Analog:
$$\frac{\partial^2}{\partial (x_1^2)^2} = \frac{\partial^2}{\partial R_2^2} + \frac{(m_1+m_2)^2}{m_2^2} \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} - \frac{2(m_1+m_2)}{m_2} \frac{\partial}{\partial R_2} \frac{\partial}{\partial r_2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial (x_1^3)^2} = \frac{\partial^2}{\partial R_3^2} + \frac{(m_1+m_2)^2}{m_2^2} \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} - \frac{2(m_1+m_2)}{m_2} \frac{\partial}{\partial R_3} \frac{\partial}{\partial r_3}$$

Und:

$$\frac{\partial}{\partial x_2^1} = \frac{\partial R_1}{\partial x_2^1} \frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{\partial r_1}{\partial x_2^1} \frac{\partial}{\partial r_1} = \frac{1}{\frac{\partial x_2^1}{\partial R_1}} \frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{1}{\frac{\partial x_2^1}{\partial r_1}} \frac{\partial}{\partial r_1}$$

$$= \frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{m_1 + m_2}{m_1} \frac{\partial}{\partial r_1}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial (x_2^1)^2} = \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} + \frac{(m_1+m_2)^2}{m_1^2} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{2(m_1+m_2)}{m_1} \frac{\partial}{\partial R_1} \frac{\partial}{\partial r_1}$$

Analog:
$$\frac{\partial^2}{\partial (x_2^2)^2} = \frac{\partial^2}{\partial R_2^2} + \frac{(m_1+m_2)^2}{m_1^2} \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{2(m_1+m_2)}{m_1} \frac{\partial}{\partial R_2} \frac{\partial}{\partial r_2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial (x_2^3)^2} = \frac{\partial^2}{\partial R_3^2} + \frac{(m_1+m_2)^2}{m_1^2} \frac{\partial^2}{\partial r_3^2} + \frac{2(m_1+m_2)}{m_1} \frac{\partial}{\partial R_3} \frac{\partial}{\partial r_3}$$

Dann gilt für den Hamiltonian:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\left(\Delta_R + \frac{(m_1+m_2)^2}{m_2^2}\Delta_r - \frac{2(m_1+m_2)}{m_2}\frac{\partial}{\partial R_i}\frac{\partial}{\partial r_i}\right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2}\left(\Delta_R + \frac{(m_1+m_2)^2}{m_1^2}\Delta_r + \frac{2(m_1+m_2)}{m_1}\frac{\partial}{\partial R_i}\frac{\partial}{\partial r_i}\right)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2}\Delta_R\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right) - \frac{\hbar^2}{2}\Delta_r\left(\frac{(m_1+m_2)^2}{m_1 m_2^2} + \frac{(m_1+m_2)^2}{m_2 m_1^2}\right)$$

$$+\frac{\hbar^2}{2}\left\{\frac{2(m_1+m_2)}{m_1 m_2} - \frac{2(m_1+m_2)}{m_1 m_2}\right\}\frac{\partial}{\partial R_i}\frac{\partial}{\partial r_i}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2}\Delta_r\left\{\frac{m_1(m_1+m_2)^2 + m_2(m_1+m_2)^2}{m_1^2 m_2^2}\right\}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2}\frac{(m_1+m_2)^3}{m_1^2 m_2^2}\Delta_r$$

Was genau geht hier (verdammt nochmal) schief?
Kann da man den Satz über die Umkehrabbildung nicht benutzen?
Dass z.B. (*) (erste Zeile) nicht benutzt werden darf, ist mir noch relativ einleuchtend, dort hat man ja kein vollständig transformiertes System gegeben, z.B. wäre dort ja auch $\frac{\partial R_i}{\partial x_2^i} = 0$, was natürlich quatsch ist. Hier liegt das Problem meines Wissens nach aber daran, dass wir nun in $\vec{r}$ eine weitere Abhängigkeit von x_2^i haben, s.d. man hier streng genommen keine partiellen Abl. mehr betrachten dürfte oder?! Bei der inversen Trafo ist mir dies allerdings nicht klar.

Antwort auf die "grosse Frage" :)

Das Problem liegt denke ich darin, dass wir hier ein mehrdimensionales Problem haben und der Satz über die Umkehrabbildung nicht mehr so einfach ist. Vielmehr gilt folgende Verallgemeinerung:

$$D(f^{-1})(y) = (Df(x))^{-1} \quad \text{mit } y = f(x)$$

Für unseren Fall heißt das Folgendes (wobei ich das jetzt nur eindim. mache um mir die Indizes zu sparen)

$$f\left(\begin{pmatrix} R \\ r \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R - \frac{m_2}{M} r \\ R + \frac{m_1}{M} r \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow Df = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial R} & \frac{\partial x_1}{\partial r} \\ \frac{\partial x_2}{\partial R} & \frac{\partial x_2}{\partial r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{m_2}{M} \\ 1 & \frac{m_1}{M} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow (Df)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{m_1}{M} & \frac{m_2}{M} \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$f^{-1}\left(\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} R \\ r \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad Df^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\partial R}{\partial x_1} & \frac{\partial R}{\partial x_2} \\ \frac{\partial r}{\partial x_1} & \frac{\partial r}{\partial x_2} \end{pmatrix}$$

Wenn du also bei * die Ableitung $\frac{\partial R}{\partial x_1}$ berechnen willst ist das nicht einfach $\frac{\partial R}{\partial x_1} = \frac{1}{\partial x_1 / \partial R} = 1$ sondern $\frac{\partial R}{\partial x_1} = (Df^{-1})_{11} = ((Df)^{-1})_{11} = \frac{m_1}{M}$ was jetzt auch wieder mit der direkten Rechnung $\frac{\partial R}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial x_1}\left(\frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{M}\right) = \frac{m_1}{M}$ zusammen passt.

b) Da hier $r = \vec{x}_2 - \vec{x}_1$ gewählt war und

$|\vec{r}| = \text{const.}$, bieten sich erst einmal Kugelkoordinaten an. ✓

Wir betrachten ab sofort nur noch den Hamiltonian der Relativbewegung, $\hat{H}_r$.

$$\hat{H}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_3^2}\right)}_{=:\Delta}$$

$=: \Delta$, wobei wir hier nicht mehr annehmen müssen, dass $\vec{r}$ der Relativabstand ist.

Dann kann man den Laplace auch "einfach" (hoho) wieder in Kugelkoordinaten transformieren und erhält (Blatt 6, Z1, d):

$$\hat{H}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\underbrace{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)}_{(1)} + \underbrace{\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}}_{(2)}\right\}$$ ✓

mit $\vec{r}$ aufgefasst als neue Koordinate und $r^2 = \vec{r}^{\,2}$

Wieso genau gilt jetzt dass $\partial/\partial r = 0$? Auf was wenden wir H dann an sodass man $|\vec{x}_2 - \vec{x}_1| = \text{const}$ benutzen kann?

(1) verschwindet wegen der Voraussetzung dass $|\vec{r}| = \text{const.}$ ✓

Wir gehen halt davon aus, dass wir keinen Impuls in r-Richtung haben.

(2) $= -\frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{L}^2$, denn es gilt:

$$\hat{L} = \frac{\hbar}{i}(\vec{r}\times\vec{\nabla}) = \frac{\hbar}{i}\left((r\vec{e}_r)\times\left(\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i}r\left(\vec{e}_r\times\left(\vec{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right)$$

$\vec{e}_r\times\vec{e}_\theta = \vec{e}_\varphi$

$\vec{e}_r\times\vec{e}_\varphi = -\vec{e}_\theta$

$$= \frac{\hbar}{i}r\left(\vec{e}_\varphi\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + (-\vec{e}_\theta)\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \vec{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$\Rightarrow \hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \vec{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left(\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \vec{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

$$= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \vec{e}_\varphi\cdot(\partial_\theta\vec{e}_\varphi)\frac{\partial}{\partial\theta} - \vec{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}(\partial_\phi\vec{e}_\theta)\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right.$$
$$\left. - \vec{e}_\varphi(\partial_\theta\vec{e}_\theta)\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \vec{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}(\partial_\phi\vec{e}_\varphi)\frac{\partial}{\partial\theta}\right)$$

$\partial_\theta\vec{e}_\varphi = 0$

$\partial_\theta\vec{e}_\theta = -\vec{e}_r$ (Blatt 6, Z1c)

$\partial_\phi\vec{e}_\theta = \cos\theta\,\vec{e}_\phi$

$\partial_\phi\vec{e}_\varphi = -\sin\theta\,\vec{e}_r - \cos\theta\,\vec{e}_\theta$

$$= -\hbar^2\left\{\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - \vec{e}_\theta\frac{1}{\sin^2\theta}\cos\theta\,\vec{e}_\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right.$$
$$\left. - \vec{e}_\varphi(-\vec{e}_r)\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \vec{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}(-\sin\theta\,\vec{e}_r - \cos\theta\,\vec{e}_\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}\right\}$$

$$= -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} \right\} = \hat{L}^2$$

$$= -\hbar^2 r^2 (2) \Leftrightarrow (2) = -\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

$$\Rightarrow \hat{H}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(-\frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{L}^2\right) = \frac{1}{2\mu r^2}\hat{L}^2 = \frac{1}{2\Theta}\hat{L}^2$$ ✓

mit $\Theta := \mu r^2$ und trivialerweise gilt $\hat{L}^2 = \hat{L}^2(\theta, \phi)$ (s.o.)

In kl. Mechanik ist Θ das Trägheitsmoment. (Hier auch ?!) ✓

3/3

c) $\hat{H}_r \psi = \lambda \psi$

Eigenwerte von $\hat{L}^2$ sind bereits aus H bekannt: $\hbar^2 l(l+1)$ ✓

und die zugehörigen Eigenfkt. sind die Kugelfl.fkt. $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ ✓

$m = -l, \dots, 0, \dots, l$, sodass man eine Entartung von $2l+1$ hat mit EW: $\frac{1}{2\Theta}\hbar^2 l(l+1)$ ✓

3/3

Gibt es hier nicht eine Matrix-schreibweise von $\hat{L}^2$? Dort steht „zu berechnen sie die Eigenwerte; die EF soll man ja nur angeben" (A

Die meinen wirklich nur, dass du das einmal angibst...

woher kommt die Wellenfkt. eigentlich?

Solltet ihr in der VL berechnet haben.

H2)

$$\psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \exp\left\{-|\vec{x}|/a\right\}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

a) $$\langle \psi(\vec{x}) | \psi(\vec{x}) \rangle = \frac{1}{\pi a^3} \underbrace{\int_{\mathbb{R}^3} e^{-2\frac{|\vec{x}|}{a}} d^3x}_{(*)\ \overset{!}{=}\ \pi a^3}$$

Muss man hier von (- unendlich) bis (unendlich) integrieren ohne Kugel-Koordinaten?

Ja

$$(*) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dx^1 dx^2 dx^3\, e^{-2\frac{\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}}{a}}, \quad z_i = \frac{x_i}{a} \Leftrightarrow dz_i = \frac{dx_i}{a}$$

$$= a^3 \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dz^1 dz^2 dz^3\, e^{-2\sqrt{z_1^2+z_2^2+z_3^2}}$$

Kugel-Koordinaten

$$= a^3 \int_0^{\infty} dr \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, e^{-2r} \underbrace{r^2 \sin\theta}_{\text{Fkt.determinante}} = a^3 \cdot 2\pi \left[-\cos\theta\right]\Big|_0^{\pi} \int_0^{\infty} dr\, r^2 e^{-2r}$$

$$= 4\pi a^3 \int_0^{\infty} dr\, \underbrace{r^2}_{u} \underbrace{e^{-2r}}_{v'} = 4\pi a^3 \left\{\left[-\frac{1}{2} e^{-2r} r^2\right]\Big|_0^{\infty} + \frac{1}{2}\int_0^{\infty} dr\, 2r e^{-2r}\right\}$$

e-Fkt ist Schwartz-Fkt.

$$= 4\pi a^3 \left\{\int_0^{\infty} dr\, r e^{-2r}\right\} = 4\pi a^3 \left\{\left[-\frac{1}{2} e^{-2r} r\right]\Big|_0^{\infty} + \frac{1}{2}\int_0^{\infty} e^{-2r} dr\right\}$$

$$= 4\pi a^3 \left\{\frac{1}{2}\left[-\frac{1}{2} e^{-2r}\right]\Big|_0^{\infty}\right\} = 2\pi a^3 \left[\frac{1}{2} - 0\right] = \pi a^3 \checkmark$$

2/2

b) $$\int_0^{\rho} dr \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, |\psi(\vec{x})|^2 \sin\theta\, r^2 = \frac{1}{\pi a^3} 4\pi \int_0^{\rho} dr\, e^{-\frac{2r}{a}} r^2$$

$$= \frac{4}{a^3}\left\{\left[-\frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}} r^2\right]\Big|_0^{\rho} + \frac{a}{2}\int_0^{\rho} 2r\, e^{-\frac{2r}{a}} dr\right\}$$

$$= \frac{4}{a^3}\left\{\left[-\frac{a}{2} e^{-\frac{2\rho}{a}} \rho^2\right] + a\left\{\left[-\frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}} r\right]\Big|_0^{\rho} + \frac{a}{2}\int_0^{\rho} e^{-\frac{2r}{a}} dr\right\}\right\}$$

$$= \frac{4}{a^3}\left\{\left(-\frac{a}{2} e^{-\frac{2\rho}{a}} \rho^2\right) - \left(\frac{a^2}{2} \rho\, e^{-\frac{2\rho}{a}}\right) + \frac{a^2}{2}\left[-\frac{a}{2} e^{-\frac{2r}{a}}\right]\Big|_0^{\rho}\right\}$$

$$= \frac{4}{a^3}\left\{\left(-\frac{a}{2} e^{-\frac{2\rho}{a}} \rho^2\right) - \frac{a^2}{2} \rho\, e^{-\frac{2\rho}{a}} - \frac{a^3}{4}\left(e^{-\frac{2\rho}{a}} - 1\right)\right\}$$

$$= -\frac{2}{a^2} \rho^2 e^{-\frac{2\rho}{a}} - \frac{2}{a} \rho\, e^{-\frac{2\rho}{a}} - e^{-\frac{2\rho}{a}} + 1 = e^{-\frac{2\rho}{a}}\left\{e^{2\rho/a} - \frac{2}{a^2}\rho^2 - \frac{2}{a}\rho - 1\right\}$$

Frage schummer im Tut: kann man (bzw. wie kann man) Integration bis Radius ρ in kart. Koordinaten schreiben? $r \le \rho$

$\Rightarrow \sqrt{x^2+y^2+z^2} \le \rho$

$\Rightarrow \int\int\int dx\,dy\,dz$ –

$$\int_{-\rho}^{\rho} \int_{-\sqrt{\rho^2-x^2}}^{\sqrt{\rho^2-x^2}} \int_{-\sqrt{\rho^2-x^2-y^2}}^{\sqrt{\rho^2-x^2-y^2}}$$

nicht zu empfehlen ☺

Dies gilt allgemein für eine Kugel mit Radius ρ.

Wertet man das an der Stelle $\rho = a$ aus, so folgt:

$$P_e(r \leq a) = e^{-2}\left(e^2 - 2 - 2 - 1\right) = \frac{e^2 - 5}{e^2} \approx 0{,}323$$

2/2

c) $$\langle \psi(\vec{x}) | V(\vec{x}) | \psi(\vec{x}) \rangle = -\frac{e^2}{\pi a^3} \langle e^{-|\vec{x}|/a} | \frac{1}{|\vec{x}|} | e^{-|\vec{x}|/a} \rangle$$

$$= -\frac{e^2}{\pi a^3} \int_{-\infty}^{\infty} dx^1 \int_{-\infty}^{\infty} dx^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx^3 \, e^{\frac{-2|\vec{x}|}{a}} \frac{1}{|\vec{x}|} = -\frac{e^2}{\pi a^3} 4\pi \int_0^{\infty} dr \, e^{-2r/a} \frac{1}{r} r^2$$

$$= -\frac{4e^2}{a^3} \int_0^{\infty} dr \, r e^{-2r/a} = \frac{-4e^2}{a^3} \left\{ \left[-\frac{a}{2} e^{-2r/a} r \right]_0^{\infty} + \frac{a}{2} \int_0^{\infty} e^{-2r/a} dr \right\}$$

$$= \frac{-4e^2}{a^3} \left\{ -\frac{a^2}{4} e^{-2r/a} \right\} \Big|_0^{\infty} = \frac{-4e^2}{a^3} \frac{a^2}{4} = -\frac{e^2}{a} = -\frac{me^4}{\hbar^2}$$ ✓

2/2

Wenn die Wellenfkt. Imaginärteil hätte, müsste man $\langle \psi(\vec{x}) |$ komplex konjugieren oder? ✓

d) $$\Delta f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial f}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \text{ in K.K.}$$

ich weiß, nicht so gut so Klammern zu schreiben meinst du, aber so sehe ich es einfacher

$$\langle \psi(\vec{x}) | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \psi(\vec{x}) \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \psi(\vec{x}) | \Delta | \psi(\vec{x}) \rangle$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\pi a^3} \langle e^{-|\vec{x}|/a} | \Delta | e^{-|\vec{x}|/a} \rangle$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m\pi a^3} \int_0^{\infty} dr \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \, r^2 \sin\theta \, e^{-r/a} \left(\Delta e^{-r/a}\right)$$

$\frac{\partial f}{\partial \phi} = \frac{\partial f}{\partial \theta} = 0$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m\pi a^3} 4\pi \int_0^{\infty} dr \, r^2 e^{-r/a} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \left(-\frac{1}{a} e^{-r/a}\right)\right)$$

$$= -\frac{2\hbar^2}{ma^3} \int_0^{\infty} dr \, e^{-r/a} \left\{ -\frac{2r}{a} e^{-r/a} + \frac{r^2}{a^2} e^{-r/a} \right\}$$

$$= -\frac{2\hbar^2}{ma^3} \int_0^{\infty} dr \left\{ \underbrace{-\frac{2r}{a} e^{-2r/a}}_{(1)} \underbrace{+ \frac{r^2}{a^2} e^{-2r/a}}_{(2)} \right\} \quad (*)$$

Wieso ist E_{kin} hier jetzt unabh. von einem n? Nicht wie beim harm. Osz. wo galt: abh. $\langle X \rangle_n$

Wir sind hier bei $n=1$.

Wo muss man die Fkt.-Determinante im Integral hinschreiben?

$$(1) = -\frac{2}{a} \left\{ \left[\frac{a}{2} e^{-2r/a} r \right]_0^{\infty} + \frac{a}{2} \int_0^{\infty} dr \, e^{-2r/a} \right\} = -\frac{a}{2}$$

$$(2) = \frac{1}{a^2} \left\{ \left[-r^2 \frac{a}{2} e^{-2r/a} \right]_0^{\infty} + a \int_0^{\infty} e^{-2r/a} r \, dr \right\} = \frac{1}{a} \int_0^{\infty} e^{-2r/a} r \, dr = \frac{a}{4} \text{ (siehe (1))}$$

Gilt $E = E_{kin} + E_{pot}$ in QM?

$$\Rightarrow (*) = -\frac{2\hbar^2}{ma^3} \left\{ -\frac{a}{2} + \frac{a}{4} \right\} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} = \frac{me^4}{2\hbar^2}$$

$$\Rightarrow E = E_{kin} + E_{pot} = -\frac{me^4}{\hbar^2} + \frac{me^4}{2\hbar^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -\frac{me^3}{2\hbar^2} eV$$ ✓

in Literatur findet man hier Faktor $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$? wo ist der hin?

anders a ...

2/2