Quantenmechanik, Blatt 10

Frederike Schrödel   Heike Herr   Jan Weber   Simon Schlepphorst

2015-06-22

Aufgabe	1	2	3	Σ
Punkte	8 /8	4 /11	26 /27	38 /46

1. Bahndrehimpuls eines Elektrons

1.a.

Die Eigenfunktionen von dem Bahndrehimpulsoperator $\hat{L}_z$ haben die Form $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)\cdot g(r)$ wobei $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ die Kugelflächenfunktion mit Parametern l und m ist, $g(r)$ eine Funktion. Wir wissen:

$$Y_{11}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin(\vartheta)e^{i\varphi}$$
$$Y_{10}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\vartheta)$$

Somit können wir den Zustand ψ als Linearkombinationen aus den beiden Eigenfunktionen $Y_{11}(\vartheta,\varphi)g(r)$ zum Eigenwert $\hbar$ und $Y_{10}(\vartheta,\varphi)g(r)$ zum Eigenwert 0 schreiben:

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{3}}\cdot Y_{11}(\vartheta,\varphi)g(r) + \frac{1}{\sqrt{3}}\cdot Y_{10}(\vartheta,\varphi)g(r)$$

Somit sind die möglichen Ergebnisse einer Messung 0 und $\hbar$. ✓ +3

1.b.

Die Wahrscheinlichkeit 0 zu messen beträgt $\frac{1}{3} = |\langle\psi|Y_{10}\rangle|^2$, die Wahrscheinlichkeit $\hbar$ zu messen beträgt $\frac{2}{3}$. ✓ +3 ✓

1.c.

Daraus ergibt sich als Erwartungswert $\langle\hat{L}_z\rangle$:

$$\langle\hat{L}_z\rangle = 0\cdot|\langle\psi|Y_{10}\rangle|^2 + \hbar\cdot|\langle\psi|Y_{11}\rangle|^2 = \frac{2}{3}\hbar$$ ✓ +2

2. Das Zweiatomige Molekül: Rotation und Vibration

Betrachtet wird folgende Schrödingergleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial r^2}+V(r)+V_c(r)\right)u_{n,r}(r)=E_{n,l}u_{n,l}(r)$$

Dabei sind: $\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$, $V_c(r)=\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$

2.a.

Nun sei $l=0$. Es soll $V(r)$ quadratisch genähert werden.
Ich setzte:

$$V(r)=\frac{1}{2}b^2(r-r_b)^2-V_0$$

Mit $V_0=konstant$. Damit folgt:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{2}b^2(r-r_b)^2\right)u_{n,r}(r)=\left(E_{n,l}+V_0\right)u_{n,l}(r)$$

Dies entspricht der Differentialgleichung für den harmonischen Oszillator. Die Energiewerte sind wohlbekannt:

$$E_n=\hbar b\left(n+\frac{1}{2}\right)-V_0$$ ✓ +2

2.b.

Sei immer noch $l=0$. Sei $r'=r-r_b$. Es soll die charakteristische Ausdehnung $\left(\Delta r'\right)_0$ des Grundzustandes $|0\rangle$ berechnet werden:

$$\begin{aligned}\left(\Delta r'\right)_0&=\sqrt{\langle r'^2\rangle_0+\langle r'\rangle_0^2}\\&=\sqrt{\langle 0|\,r'^2\,|0\rangle+\langle 0|\,r'\,|0\rangle^2}\end{aligned}$$

Sei $a \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{\mu b}}$. Dann kann r' durch die Leiteroperatoren wie folgt ausgedrückt werden: $r' = a\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right)$. Damit folgt:

$$
\begin{aligned}
&= \sqrt{\langle 0|\, a^2 \left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right)^2 |0\rangle + \underbrace{\langle 0|\, a\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right)|0\rangle^2}_{=0}} \\
&= \sqrt{\langle 0|\, a^2 \left(\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\right)|0\rangle} \\
&= a\sqrt{\underbrace{\langle 0|\, \hat{a}^{\dagger^2} |0\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle 0|\, \hat{a}^2 |0\rangle}_{=0} + \langle 0|\underbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger}_{\hat{N}+1}|0\rangle} \\
&= a\sqrt{\underbrace{\langle 0|\, \hat{N}\, |0\rangle}_{=0} + \underbrace{\langle 0|0\rangle}_{=1}} \qquad \text{Näherung?} \\
&= a \quad \checkmark \quad +2
\end{aligned}
$$

3. Störungen des Wasserstoffatoms

Betrachtet wird der Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms unter Einfluss eines zusätzlichen Störpotentials

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{r} + \frac{\tilde{\epsilon}}{r^2}$$

mit $\tilde{\epsilon}$ konstant.

3.a.

Es soll gezeigt werden, dass sich für den radialen Anteil folgende Differentialgleichung ergibt:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\hbar^2}{2m}\left(l\left(l+1\right)+\epsilon\right) - \frac{e^2}{r}\right)R(r) = ER(r)$$

Für $\hat{H}$ ergibt sich:

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{r} + \frac{\tilde{\epsilon}}{r^2} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}\right) - \frac{e^2}{r} + \frac{\tilde{\epsilon}}{r^2}
\end{aligned}
$$

Setze nun:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = Y(\theta,\varphi)\frac{R(r)}{r}$$

Anwenden von $\hat{H}$ auf ψ gibt dann:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\psi(r,\theta,\varphi) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}\right)-\frac{e^2}{r}+\frac{\tilde{\epsilon}}{r^2}\right)Y(\theta,\varphi)\frac{R(r)}{r} \\
&= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(rR'(r)-R(r)\right)-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^3}R(r)\right)-\frac{e^2}{r^2}R(r)+\frac{\tilde{\epsilon}R(r)}{r^3}\right)Y(\theta,\varphi) \\
&= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{R''(r)}{r}-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^3}R(r)\right)-\frac{e^2}{r^2}R(r)+\frac{\tilde{\epsilon}R(r)}{r^3}\right)Y(\theta,\varphi) \\
&= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{R''(r)}{r}-\frac{l(l+1)}{r^3}R(r)\right)-\frac{e^2}{r^2}R(r)+\frac{\tilde{\epsilon}R(r)}{r^3}\right)Y(\theta,\varphi)
\end{aligned}$$

Kürzen von $\frac{Y(\theta,\varphi)}{r}$ gibt dann:

$$\begin{aligned}
&\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)-\frac{e^2}{r}+\frac{\tilde{\epsilon}}{r^2}\right)R(r)=ER(r) \\
\Leftrightarrow &\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}-\frac{e^2}{r}+\frac{\tilde{\epsilon}}{r^2}\right)R(r)=ER(r) \\
\Leftrightarrow &\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{\hbar^2\left(l(l+1)+\frac{2m\tilde{\epsilon}}{\hbar^2}\right)}{2mr^2}-\frac{e^2}{r}\right)R(r)=ER(r)
\end{aligned}$$

Setze $\epsilon \equiv \frac{2m\tilde{\epsilon}}{\hbar^2}$

$$\Leftrightarrow\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{\hbar^2(l(l+1)+\epsilon)}{2mr^2}-\frac{e^2}{r}\right)R(r)=ER(r) \quad ✓ \ +6 \tag{1}$$

3.b.

Nun soll das Verhalten für $r\to 0$ diskutiert werden.
Für $r\to 0$ dominiert der quadratisch in r abfallende Term, so dass folgt:

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R(r)=\frac{l(l+1)+\epsilon}{r^2}R(r)$$

Setze $R(r)\propto r^\sigma$:

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r^\sigma=\frac{l(l+1)+\epsilon}{r^2}r^\sigma \\
\Leftrightarrow &\sigma(\sigma+1)r^{\sigma-2}=(l(l+1)+\epsilon)r^{\sigma-2} \\
\Leftrightarrow &\sigma(\sigma+1)=(l(l+1)+\epsilon) \\
\Rightarrow &\sigma=\frac{1}{2}\pm\sqrt{\frac{1}{4}+l(l+1)+\epsilon} \\
\Rightarrow &R(r)\propto r^{\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{1}{4}+l(l+1)+\epsilon}} \quad ✓ \quad +3
\end{aligned}$$

Die negative Lösung für σ fällt weg, da wir Normierbarkeit fordern.

3.c.

Nun soll der andere Grenzfall für $r \to \infty$ diskutiert werden.
Für $r \to \infty$ dominiert der lineare Term $ER(r)$ gegenüber den mit r abfallenden, so dass folgt:

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2}R(r)$$

Betrachtet werden gebundene Zustände, also ist die Energie negativ. Setze darum $\kappa \equiv \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$:

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R(r) = \kappa^2 R(r)$$

Es ergibt sich also für $R(r)$

$$R(r) \propto \mathrm{e}^{-\kappa r} + \mathrm{e}^{\kappa r}$$

Wiederum folgt aus der Forderung, dass $R(r)$ normierbar sein soll:

$$R(r) \propto \mathrm{e}^{-\kappa r}$$

Wir bekommen also:

$$R(r) = r^\sigma \mathrm{e}^{-\kappa r} W(r)$$

+3

3.d.

Nun soll für $W(r)$ eine Differentialgleichung hergeleitet werden.
Dazu betrachte ich $\hat{H}R(r)$. Da das recht unübersichtlich wird, betrachte ich zuerst $R''(r)$:

$$\begin{aligned}
R''(r) &= \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\left(r^\sigma \mathrm{e}^{-\kappa r} W(r)\right) \\
&= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(\sigma r^{\sigma-1}\mathrm{e}^{-\kappa r}W(r) - \kappa r^\sigma \mathrm{e}^{-\kappa r}W(r) + r^\sigma \mathrm{e}^{-\kappa r}W'(r)\right) \\
&= \sigma(\sigma-1)r^{\sigma-2}\mathrm{e}^{-\kappa r}W(r) - \kappa\sigma r^{\sigma-1}\mathrm{e}^{-\kappa r}W(r) + \sigma r^{\sigma-1}\mathrm{e}^{-\kappa r}W'(r) \\
&\quad - \sigma\kappa r^{\sigma-1}\mathrm{e}^{-\kappa r}W(r) + \kappa^2 r^\sigma \mathrm{e}^{-\kappa r}W(r) - \kappa r^\sigma \mathrm{e}^{-\kappa r}W'(r) \\
&\quad + \sigma r^{\sigma-1}\mathrm{e}^{-\kappa r}W'(r) - \kappa r^\sigma \mathrm{e}^{-\kappa r}W'(r) + r^\sigma \mathrm{e}^{-\kappa r}W''(r)
\end{aligned}$$

Es folgt:

$$
\begin{aligned}
R''(r)\,r^{-\sigma}e^{\kappa r} &= \frac{1}{r^2}\sigma(\sigma-1)\,W(r) - \frac{1}{r}\kappa\sigma W(r) + \frac{1}{r}\sigma W'(r) \\
&\quad - \frac{1}{r}\sigma\kappa W(r) + \kappa^2 W(r) - \kappa W'(r) \\
&\quad + \frac{1}{r}\sigma W'(r) - \kappa W'(r) + W''(r) \\
&= \left(\frac{\sigma(\sigma-1)}{r^2} - \frac{2\kappa\sigma}{r} + \kappa^2\right) W(r) + 2\left(\frac{\sigma}{r} - \kappa\right) W'(r) + W''(r)
\end{aligned}
$$

Setze $\lambda \equiv \frac{2me^2}{\hbar^2}$. Damit kann (1) wie folgt geschrieben werden:

$$
\begin{aligned}
&\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\sigma(\sigma-1)}{r^2} - \frac{\lambda}{r}\right) R(r) = -\kappa^2 R(r) \\
\Leftrightarrow & -R''(r) + \left(\frac{\sigma(\sigma-1)}{r^2} - \frac{\lambda}{r}\right) R(r) = -\kappa^2 R(r) \\
\Leftrightarrow & -\left(\cancel{\frac{\sigma(\sigma-1)}{r^2}} - \frac{2\kappa\sigma}{r} + \cancel{\kappa^2}\right) W(r) - 2\left(\frac{\sigma}{r} - \kappa\right) W'(r) - W''(r) \\
& + \left(\cancel{\frac{\sigma(\sigma-1)}{r^2}} - \frac{\lambda}{r}\right) W(r) = \cancel{-\kappa^2 W(r)} \\
\Leftrightarrow & \left(\frac{2\kappa\sigma}{r} - \frac{\lambda}{r}\right) W(r) - 2\left(\frac{\sigma}{r} - \kappa\right) W'(r) - W''(r) = 0
\end{aligned}
$$

✓ +5

3.e.

Nun soll als Ansatz für $W(r)$ das Polynom

$$
W(r) = \sum_s c_s r^s
$$

verwendet werden. Einsetzen gibt:

$$
\begin{aligned}
&(2\kappa\sigma - \lambda)\sum_s c_s r^{s-1} - 2\sigma \sum_s s c_s r^{s-2} - 2\kappa \sum_s s c_s r^{s-1} - \sum_s s(s-1) c_s r^{s-2} = 0 \\
\Leftrightarrow & (2\kappa\sigma - \lambda)\sum_s c_s r^{s-1} - 2\sigma \sum_s (s+1) c_{s+1} r^{s-1} + 2\kappa \sum_s s c_s r^{s-1} - \sum_s s(s+1) c_{s+1} r^{s-1} = 0 \\
\Leftrightarrow & \sum_s \left((2\kappa\sigma - \lambda + 2\kappa s) c_s - (2\sigma(s+1) + s(s+1)) c_{s+1}\right) r^{s-1} = 0 \\
\Leftrightarrow & \sum_s \left((2\kappa(\sigma+s) - \lambda) c_s - (s+1)(2\sigma+s) c_{s+1}\right) r^{s-1} = 0 \\
\Leftrightarrow & (2\kappa(\sigma+s) - \lambda) c_s - (s+1)(2\sigma+s) c_{s+1} = 0 \\
\Leftrightarrow & c_{s+1} = c_s \frac{2\kappa(\sigma+s) - \lambda}{(s+1)(2\sigma+s)}
\end{aligned}
$$

✓

Nun stellt sich die Frage ob die Summe für $r \to \infty$ verschwindet, also ob die Funktion noch normierbar ist. Dazu betrachte ich folgenden Grenzwert:

$$
\begin{aligned}
\lim_{s\to\infty} \frac{c_{s+1}}{c_s} &= \lim_{s\to\infty} \frac{2\kappa(\sigma+s)-\lambda}{(s+1)(2\sigma+s)} \\
&= \lim_{s\to\infty} \frac{2\kappa\sigma+2\kappa s-\lambda}{s^2+s+2\sigma s+2\sigma} \\
&\approx 3\kappa+\frac{\kappa}{\sigma}+\frac{2\kappa s-\lambda}{2\sigma} \\
&\geq 0
\end{aligned}
$$

ist so aber schön!

Ja. Kannst auch so für $s \to \infty$ betrachten.

Die Grenzwertbetrachtung zeigt, dass das Polynom für große s nicht verschwindet, sondern die Koeffizienten sogar größer werden. Da dies nicht normierbar ist, muss die Rekursionsformel abbrechen, weswegen gelten muss:

Dann $c_s = \frac{(2\kappa)^s}{s!} c_0$

$$2\kappa(\sigma+s) \stackrel{!}{=} \lambda$$ ✓

Somit bekommt man die folgende Energie:

↳ $w = c_0 e^{2\kappa r}$ → muss abbrechen, da $w \to \infty$ für $r \to \infty$

$$
\begin{aligned}
\kappa^2 &= \frac{\lambda^2}{4(\sigma+s)^2} \\
\Leftrightarrow -\frac{2mE}{\hbar^2} &= \frac{m^2e^4}{\hbar^4(\sigma+s)^2} \\
\Leftrightarrow E &= \frac{-me^4}{2\hbar^2(\sigma+s)^2}
\end{aligned}
$$ ✓

~~Woher kommt dein κ^2~~ Ups... Sorry!

~~$\kappa = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar}} \Rightarrow E = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\lambda^2}{4(\sigma+s)^2}$~~

+6

Trotzdem +6

3.f.

Nun soll die Näherung $\epsilon << (2l+1)^2$ benutzt werden, was nichts anderes ist, als die Störung zu Vernachlässigen, woraus sofort $\sigma = l+1$ folgt. Dann ist die Energie:

$$
\begin{aligned}
E &= \frac{-me^4}{2\hbar^2(\sigma+s)^2} \\
&= \frac{-me^4}{2\hbar^2(l+1+s)^2}
\end{aligned}
$$

Eigentlich solltest du in E entwickeln.

Setzte $n \equiv l+s+1$:

$$E_n = \frac{-me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$ +3