TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

## Lösungen zur Quantentheorie 1, Sommersemester 2023

Dr. J. M. Link, Prof. Dr. C. Timm Blatt 10

# Präsenzübungen

### Aufgabe 1:

Der Impuls $\hat{\vec{p}}$ und der Drehimpuls $\hat{\vec{J}}$ sind z. B. ungerade unter Zeitumkehr.

Weil $\hat{H}$ unter Zeitumkehr invariant und $|\psi\rangle$ ein Eigenzustand zu $\hat{H}$ ist, gilt

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{1}$$
$$\Rightarrow \quad \hat{T}\hat{H}|\psi\rangle = \hat{T}E|\psi\rangle \tag{2}$$
$$\Rightarrow \quad \hat{H}\hat{T}|\psi\rangle = E\hat{T}|\psi\rangle. \tag{3}$$

Es folgt, dass $\hat{T}|\psi\rangle$ ein Eigenzustand mit derselben Eigenenergie $E$ ist. Der Eigenvektor $|\psi\rangle$ ist aber nach Voraussetzung nicht entartet. Daher muss gelten

$$\hat{T}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle. \tag{4}$$

(In der Vorlesung wurde gezeigt, dass das für Systeme mit halbzahligem Gesamtdrehimpuls nicht möglich ist. Also ist das in dieser Aufgabe betrachtete System kein solches.) Der Erwartungswert von $\hat{A}$ ist $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$. Da $\hat{A}$ ungerade unter Zeitumkehr ist, gilt

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = -\langle\psi|\hat{T}^\dagger\hat{A}\hat{T}|\psi\rangle = -\langle\psi|\lambda^*\hat{A}\lambda|\psi\rangle = -|\lambda|^2\,\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle. \tag{5}$$

Da $|\lambda|^2$ positiv ist, folgt $\langle\psi|A|\psi\rangle = 0$.

### Aufgabe 2:

Seien

$$\vec{r}_1 = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}, \quad \vec{r}_2 = \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix}, \quad \vec{R} = \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}, \quad \vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}. \tag{6}$$

(a) Es gilt

$$\begin{aligned} (m_1+m_2)\vec{R} &= m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2 \\ \Rightarrow \quad \vec{R} &= \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2} \end{aligned} \tag{7}$$

und $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$. Daraus folgt

$$\vec{r}_1 = \vec{R} + \frac{m_2}{m_1+m_2}\,\vec{r}, \quad \vec{r}_2 = \vec{R} - \frac{m_1}{m_1+m_2}\,\vec{r} \tag{8}$$

und mit der Kettenregel

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i}\,\vec{\nabla}_{\vec{R}} &= \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \partial/\partial X \\ \partial/\partial Y \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial(x_1,y_1)}{\partial(X,Y)}\begin{pmatrix} \partial/\partial x_1 \\ \partial/\partial y_1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{i}\,\frac{\partial(x_2,y_2)}{\partial(X,Y)}\begin{pmatrix} \partial/\partial x_2 \\ \partial/\partial y_2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{i}\,\vec{\nabla}_{\vec{r}_1} + \frac{\hbar}{i}\,\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} =: \vec{P} \end{aligned} \tag{9}$$

mit

$$\frac{\partial(x_1,y_1)}{\partial(X,Y)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial X} & \frac{\partial x_1}{\partial Y} \\ \frac{\partial y_1}{\partial X} & \frac{\partial y_1}{\partial Y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\partial(x_2,y_2)}{\partial(X,Y)} \tag{10}$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\vec{r}} = \frac{\hbar}{i}\begin{pmatrix} \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial(x_1,y_1)}{\partial(x,y)}\begin{pmatrix} \partial/\partial x_1 \\ \partial/\partial y_1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{i}\frac{\partial(x_2,y_2)}{\partial(x,y)}\begin{pmatrix} \partial/\partial x_2 \\ \partial/\partial y_2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{m_2}{m_1+m_2}\vec{\nabla}_{\vec{r}_1} - \frac{\hbar}{i}\frac{m_1}{m_1+m_2}\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} =: \vec{\pi} \end{aligned} \tag{11}$$

mit

$$\frac{\partial(x_1,y_1)}{\partial(x,y)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial x} & \frac{\partial x_1}{\partial y} \\ \frac{\partial y_1}{\partial x} & \frac{\partial y_1}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{m_2}{m_1+m_2} & 0 \\ 0 & \frac{m_2}{m_1+m_2} \end{pmatrix}, \tag{12}$$

$$\frac{\partial(x_2,y_2)}{\partial(x,y)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_2}{\partial x} & \frac{\partial x_2}{\partial y} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x} & \frac{\partial y_2}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{m_1}{m_1+m_2} & 0 \\ 0 & -\frac{m_1}{m_1+m_2} \end{pmatrix}. \tag{13}$$

Also ist

$$\vec{p}_1 = \frac{m_1}{m_1+m_2}\vec{P} + \vec{\pi}, \quad \vec{p}_2 = \frac{m_2}{m_1+m_2}\vec{P} - \vec{\pi}. \tag{14}$$

Es folgt

$$\begin{aligned} H = \frac{1}{2m_1}\left[\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\right)^2 P^2 + 2\frac{m_1}{m_1+m_2}\vec{P}\cdot\vec{\pi} + \pi^2\right] \\ &+ \frac{1}{2m_2}\left[\left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\right)^2 P^2 - 2\frac{m_2}{m_1+m_2}\vec{P}\cdot\vec{\pi} + \pi^2\right] \\ &+ V(r) \\ &= \frac{P^2}{2(m_1+m_2)} + \frac{\pi^2}{2m^*} + V(r) \end{aligned} \tag{15}$$

mit $1/m^* = 1/m_1 + 1/m_2$, $m^*$ ist die reduzierte Masse.

(b) Separationsansatz:

$$\left(\frac{P^2}{2(m_1+m_2)} + \frac{\pi^2}{2m^*} + V(r)\right)\phi(\vec{R})\psi(\vec{r}) = E\,\phi(\vec{R})\psi(\vec{r}). \tag{16}$$

Es folgt

$$\underbrace{\frac{\frac{P^2}{2(m_1+m_2)}\phi(\vec{R})}{\phi(\vec{R})}}_{=E_R} + \underbrace{\frac{\left(\frac{\pi^2}{2m^*} + V(r)\right)\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})}}_{=E_r} = E \tag{17}$$

und daraus für den Schwerpunkt

$$\frac{P^2}{2(m_1+m_2)}\phi(\vec{R}) = E_R\,\phi(\vec{R}). \tag{18}$$

Das ist die Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen der Masse $M = m_1 + m_2$. Andererseits folgt

$$\left(\frac{\pi^2}{2m^*} + V(r)\right)\psi(\vec{r}) = E_r\psi(\vec{r}). \tag{19}$$

Das ist die Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen der reduzierten Masse $m^* = 1/(1/m_1 + 1/m_2)$ in Zentralpotential $V(r)$.

## Hausaufgaben

### Aufgabe 3:

Die Grundzustandswellenfunktion lautet

$$\psi_{100}(\vec{r}) = R_{10}(r)\, Y_{00}(\vartheta, \varphi) = \frac{2}{a_B^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{a_B}\right) \frac{1}{\sqrt{4\pi}}. \tag{20}$$

(a) Die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte erhalten wir durch Integration über den Raumwinkel $\Omega$,

$$\begin{aligned} w_{nl}(r)\, dr &= r^2 dr \int d\Omega\, |\psi_{nlm}(\vec{r})|^2 \\ &= r^2\, dr\, |R_{nl}(r)|^2. \end{aligned} \tag{21}$$

Der wahrscheinlichste Wert von $r$ ist derjenige, der $w_{10}(r)$ maximal macht:

$$w_{10}(r) = \frac{4}{a_B^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_B}\right) r^2 \tag{22}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{dw_{10}}{dr} = \frac{4}{a_B^3}\left(2r - \frac{2r^2}{a_B}\right) \exp\left(-\frac{2r}{a_B}\right) = 0 \tag{23}$$

$$\Rightarrow \quad r_{10}^{\max} = a_B. \tag{24}$$

(b) Die Wahrscheinlichkeit für $r > a_B$ ist

$$\begin{aligned} W &= \int_{a_B}^{\infty} dr\, w_{10}(r) = \frac{4}{a_B^3} \int_{a_B}^{\infty} dr\, r^2 e^{-2r/a_B} = \frac{1}{2} \int_2^{\infty} d\varrho\, \varrho^2 e^{-\varrho} \\ &= \frac{1}{2}\left[ -\varrho^2 e^{-\varrho}\Big|_2^{\infty} + (-2\varrho e^{-\varrho})\Big|_2^{\infty} + 2\int_2^{\infty} d\varrho\, e^{-\varrho} \right] \\ &= \frac{10}{2}\, e^{-2} \approx 0{,}6767. \end{aligned} \tag{25}$$

(c) Die Erwartungswerte von $r^k$ im Grundzustand sind

$$\begin{aligned} \langle r^k \rangle_{10} &= \int d^3r\, r^k |\psi_{100}(\vec{r})|^2 = \int_0^{\infty} dr\, r^{2+k} |R_{10}(r)|^2 \\ &= \int_0^{\infty} dr\, r^k w_{10}(r) = \frac{4}{a_B^3} \int_0^{\infty} dr\, r^{2+k} e^{-2r/a_B}. \end{aligned} \tag{26}$$

Zur Abkürzung sei $\varrho = 2r/a_B$, dann ist

$$\begin{aligned} \langle r^k \rangle_{10} &= \frac{a_B^k}{2^{k+1}} \int_0^{\infty} d\varrho\, \varrho^{k+2} e^{-\varrho} = \frac{a_B^k}{2^{k+1}}\, \Gamma(k+3) \\ &= \frac{a_B^k}{2^{k+1}}\, (k+2)!\,. \end{aligned} \tag{27}$$

Speziell gilt

$$k = 1: \quad \langle r \rangle_{10} = \frac{3}{2}\, a_B \tag{28}$$

$$k = 2: \quad \langle r^2 \rangle_{10} = \frac{4!}{8}\, a_B^2 = 3a_B^2 \tag{29}$$

$$\Rightarrow \quad \Delta r_{10} = \sqrt{\langle r^2 \rangle_{10} - (\langle r \rangle_{10})^2} = a_B \sqrt{3 - \frac{9}{4}} = \frac{\sqrt{3}}{2}\, a_B \tag{30}$$

(d) Analog zu (a) ist

$$\tilde{w}(p)\,dp = p^2\,dp \int d\Omega_p\,|\tilde{\psi}_{100}(\vec{p})|^2. \tag{31}$$

Nun ist

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}_{100}(\vec{p}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r\, e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\psi_{100}(\vec{r}) \\
&= \frac{2}{\sqrt{4\pi}}\,\frac{1}{(2\pi\hbar a_B)^{3/2}} \int_0^\infty dr\, r^2\, e^{-r/a_B} \int_0^{2\pi} d\varphi\, \underbrace{\int_{-1}^{1} d(\cos\vartheta)\, e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\vartheta}}_{=\frac{1}{-\frac{i}{\hbar}pr}\left(e^{-\frac{i}{\hbar pr}}-e^{\frac{i}{\hbar pr}}\right)} \\
&= \frac{2}{\sqrt{4\pi}}\,\frac{2\pi}{(2\pi\hbar a_B)^{3/2}}\,\frac{i\hbar}{p}\left(\int_0^\infty dr\, r\, e^{-\left(\frac{1}{a_B}+\frac{ip}{\hbar}\right)r} - \int_0^\infty dr\, r\, e^{-\left(\frac{1}{a_B}-\frac{ip}{\hbar}\right)r}\right) \\
&= \frac{1}{\pi\sqrt{2\hbar}}\,\frac{i}{p a_B^{3/2}}\left(\frac{1}{1/a_B+ip/\hbar}\int_0^\infty dr\, e^{-\left(\frac{1}{a_B}+\frac{ip}{\hbar}\right)r} - \frac{1}{1/a_B-ip/\hbar}\int_0^\infty dr\, e^{-\left(\frac{1}{a_B}-\frac{ip}{\hbar}\right)r}\right) \\
&= \frac{i}{\pi\sqrt{2\hbar}\,p a_B^{3/2}}\left(\frac{1}{(1/a_B+ip/\hbar)^2} - \frac{1}{(1/a_B-ip/\hbar)^2}\right) \\
&= \frac{4/(\hbar a_B)}{\pi\sqrt{2\hbar}\,a_B^{3/2}}\,\frac{1}{(1/a_B^2+p^2/\hbar^2)^2} \\
&= \frac{2\sqrt{2}\,\hbar^{5/2}}{\pi a_B^{5/2}}\,\frac{1}{(p^2+\hbar^2/a_B^2)^2}.
\end{aligned} \tag{32}$$

Die Wellenfunktion im Impulsraum hat also keine Winkelabhängigkeit und es folgt

$$\tilde{w}(p) = 4\pi p^2\,|\tilde{\psi}_{100}(\vec{p})|^2 = \frac{32}{\pi}\left(\frac{\hbar}{a_B}\right)^5 \frac{p^2}{(p^2+\hbar^2/a_B^2)^4}. \tag{33}$$

Das Maximum tritt auf bei

$$0 = \frac{d\tilde{w}}{dp} = \frac{32}{\pi}\left(\frac{\hbar}{a_B}\right)^5 \frac{(p^2+\hbar^2/a_B^2)^4 2p - 4p^2 2p(p^2+\hbar^2/a_B^2)^3}{(p^2+\hbar^2/a_B^2)^8} \tag{34}$$

$$\Rightarrow \quad p^2 + \frac{\hbar^2}{a_B^2} = 4p^2. \tag{35}$$

Also ist

$$p_{10}^{\max} = \frac{1}{\sqrt{3}}\,\frac{\hbar}{a_B} \approx 0{,}5774\,\frac{\hbar}{a_B} \tag{36}$$

der wahrscheinlichste Wert des Impulsbetrages.

**Aufgabe 4:**

Die Eigenfunktionen sind $\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)$. Speziell für $n=2$, $l=1$, $m=\pm1$ ergibt sich

$$\psi_{2,1,1}(\vec{r}) = \underbrace{\frac{r}{\sqrt{3}\,a_B^{5/2}}\,e^{-r/2a_B}}_{=R_{21}(r)}\;\underbrace{(-1)\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\sin\theta\,e^{i\varphi}}_{=Y_{1,1}(\theta,\varphi)}, \tag{37}$$

$$\psi_{2,1,-1}(\vec{r}) = \underbrace{\frac{r}{\sqrt{3}\;a_B^{5/2}}\,e^{-r/2a_B}}_{=R_{21}(r)}\;\underbrace{(+1)\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\sin\theta\,e^{-i\varphi}}_{=Y_{1,-1}(\theta,\varphi)}. \tag{38}$$

(a) Damit folgt

$$\phi_1(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \left(e^{-i\varphi} + e^{i\varphi}\right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21}(r) \sin\theta \cos\varphi, \tag{39}$$

$$\phi_2(\vec{r}) = \frac{i}{\sqrt{2}} R_{21}(r) \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \left(e^{-i\varphi} - e^{i\varphi}\right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{21}(r) \sin\theta \sin\varphi. \tag{40}$$

Der Hamiltonoperator lautet

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{2Mr^2} \hat{\vec{L}}^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}. \end{aligned} \tag{41}$$

Einsetzen von $H$ und $\phi_{1,2}(\vec{r})$ in die Schrödinger-Gleichung $H\phi_{1,2}(\vec{r}) = E\phi_{1,2}(\vec{r})$ zeigt, dass diese mit

$$E = E_2 = -\frac{E_R}{2^2} = -\frac{\hbar^2}{8Ma_B^2} \tag{42}$$

erfüllt ist (wurde mit Mathematica durchgeführt). Dies muss so sein, weil $\phi_{1,2}(\vec{r})$ Linearkombinationen von Eigenfunktionen von $H$ zu demselben Eigenwert sind.

(b) $\phi_1$ und $\phi_2$ in Glg. (39) bzw. (40) sind offensichtlich reell.

Eine Isofläche von $\phi_1(\vec{r})$ ist in Abb. 1 dargestellt. $\phi_2(\vec{r})$ ist gegenüber $\phi_1(\vec{r})$ um 90° um die $z$-Achse gedreht. Es handelt sich bei $\phi_1$ und $\phi_2$ um die konventionellen $p_x$- und $p_y$-Orbitale, und bei $\psi_{1,1,0}$ um das $p_z$-Orbital.

(a)

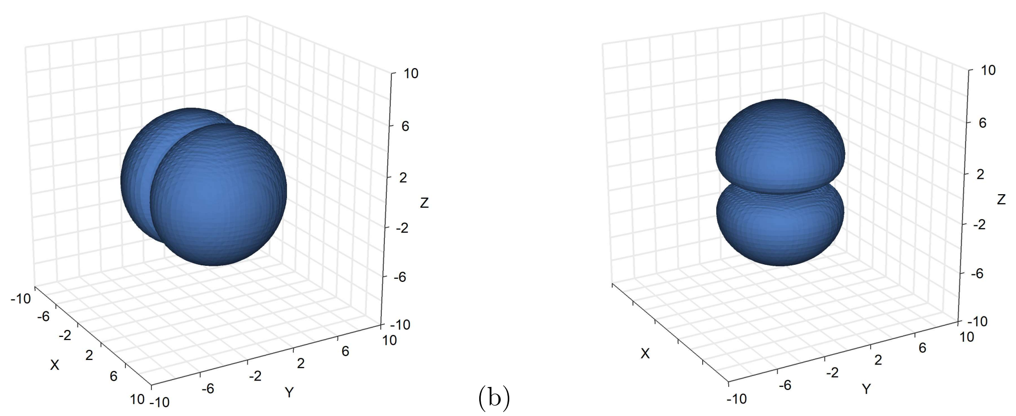


Abbildung 1: (a) Isofläche von $\phi_1$. Die entsprechende Isofläche von $\phi_2$ ist um 90° um die $z$-Achse gedreht. (b) Isofläche von $\psi_{2,1,0}$.