

II

$$\Delta \text{ in Kugelkoordin. : } \Delta = \frac{1}{r} \cdot \partial_r^2 r - \frac{1}{r^2} \underline{L}^2$$

(a) In Kugelkoordin. gilt:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r} \partial_r^2 r - \frac{1}{r^2} \underline{L}^2 \right) + V$$

Two ⑧

Wird der Koordinaten Ursprung stets zwischen den beiden

Kernpunkten liegt, sind $r = \text{const.}$ sein, weil dieVerbindung starr ist. $\Rightarrow \partial_r^2 r = 0$; außerdem habenwir kein Potential $\Rightarrow V=0$.

$$H = +\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \underline{L}^2$$

$$I^{ij} = \int \rho (\delta^{ij} \underline{r} - r_i r_j) d\underline{r}$$

$$\rho = \frac{M}{2} \delta(\underline{r} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ R \end{pmatrix}) + \frac{M}{2} \delta(\underline{r} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ R \end{pmatrix})$$

Atome sind Massenp. St.
als Masse $M/2$ mit
Rad. $R \sim 46 \text{ pm}$ $2R$.

$$I^{xx} = I_{\perp} = \int \rho \cdot (y^2 + z^2) d\underline{r} = \frac{M}{2} [(0 + R^2) + (0 + R^2)] = MR^2$$

* gilt auch
für alle anderen
Achsen:
 $r = \text{const.}$ gilt
im ganzen
System:
 $\partial_r = 0$.r: Kugelkoordin.
R: Fixer Rad.
Abst. d. Atome:
 $2R$
M: Gesamtmasse
des Systems

$$I^{zz} = I_{\parallel} = \int \rho \cdot (x^2 + y^2) d\underline{r} = 0$$

$$\mu = \left(\frac{1}{M/2} + \frac{1}{M/2} \right)^{-1} = \frac{M}{4}, \quad r = 2R$$

$$H = \frac{1}{2\mu r^2} \underline{L}^2 = \frac{1 \cdot 4}{2 \cdot M \cdot 4 R^2} \cdot \underline{L}^2 = \frac{\underline{L}^2}{2MR^2} = \frac{\underline{L}^2}{RI_{\perp}}$$

(b) Es ist

$$H\psi = E\psi,$$

also ist in EV von H mit einer E . Da

$$H = \frac{1}{2I_{\perp}} \cdot \underline{L}^2$$

$$\text{und } \underline{L}^2 |l, m\rangle = l(l+1) \hbar^2 |l, m\rangle. \text{ Die } |l, m\rangle$$

sind also Eigenzustände, da

$$H |l, m\rangle = E |l, m\rangle = \frac{1}{2I_{\perp}} \cdot \underline{L}^2 |l, m\rangle = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I_{\perp}} |l, m\rangle$$

$$\Rightarrow E = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I_{\perp}}$$

(2)

-20-

(a) 1) zeige exemplarisch, dass $[L^2, L_x] = 0$; daraus
kann man analog $[L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0$ bestimmen.

Dazu benötigen wir $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $[L_x, L_z] = -i\hbar L_y$

$$\vec{L} = \underline{x} \times \underline{p} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y p_z - z p_y \\ z p_x - x p_z \\ x p_y - y p_x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} 2) [L_x, L_y] &= [y p_z - z p_y, z p_x - x p_z] \\ &= [y p_z, z p_x] + [y p_z, -x p_z] - [z p_y, z p_x] + [z p_y, -x p_z] \\ &= y p_x [p_z, z] + x p_y [z, p_z] = i\hbar (x p_y - y p_x) \\ &= i\hbar L_z \quad ([L_x, L_z] \text{ analog!}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [L^2, L_x] &= [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_x] \\ &= [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \\ &= 0 + L_y [L_y, L_x] + [L_y, L_x] L_y + L_z [L_z, L_x] + [L_z, L_x] L_z \\ &= -i\hbar L_y L_z - i\hbar L_z L_y + i\hbar L_z L_y + i\hbar L_y L_z \\ &= 0 \end{aligned}$$

Es gilt folglich mit $[L^2, L_i] = 0$ $i = x, y, z$:

$$[L^2, \frac{L_i^2}{2I_i}] = -[\frac{L_i^2}{2I_i}, L^2] = -\frac{L_i}{2I_i} [L_i, L^2] - \frac{1}{2I_i} [L_i, L^2] L_i = 0,$$

also auch $[L^2, L_i^2] = 0$, und so auch $[L^2, H] = 0$,
da H aus L_i^2 en besteht.

[2]

$$(a) \quad L_{\pm} = L_x \pm iL_y \quad (L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2)$$

$$\text{Hence } L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-) \quad L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$$

$$H = \frac{L_x^2}{2I_x} + \frac{L_y^2}{2I_y} + \frac{L_z^2}{2I_z} = \frac{1}{8I_x}(L_+ + L_-)^2 - \frac{1}{8I_y}(L_+ - L_-)^2 + \frac{L_z^2}{2I_z}$$

$$= \cancel{\frac{1}{8I_x}} \frac{1}{8I_x} (L_+^2 + \cancel{L_+L_-} + \cancel{L_-L_+} + L_-^2) - \frac{1}{8I_y} (L_+^2 + L_-^2 - \cancel{L_+L_-} - \cancel{L_-L_+}) + \frac{L_z^2}{2I_z}$$

$$= \cancel{\frac{1}{8I_x}} \frac{1}{8I_x} (L_+^2 + L_-^2) + \frac{1}{8I_y} (L_-L_+ + L_+L_-) + \frac{1}{8I_y} (L_+L_- + L_-L_+) + \frac{L_z^2}{2I_z}$$

$$= \frac{1}{8} \left(\frac{1}{I_x} - \frac{1}{I_y} \right) (L_+^2 + L_-^2) + \frac{1}{8I_y} (L_-L_+ + L_+L_-) + \frac{1}{8I_y} (L_+L_- + L_-L_+) + \frac{L_z^2}{2I_z}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{8} \left(\frac{1}{I_x} - \frac{1}{I_y} \right) (L_+^2 + L_-^2) + \cancel{\frac{1}{8I_y}} \frac{1}{8} \left(\frac{1}{I_x} + \frac{1}{I_y} \right) (L_-L_+ + L_+L_-) + \frac{L_z^2}{2I_z}$$

$$L_+L_- + L_-L_+ = L_+L_- + L_+L_- + [L_-, L_+] = 2L_+L_- + -2L_z$$

$$\Rightarrow \frac{1}{8} \underbrace{\left(\frac{1}{I_x} - \frac{1}{I_y} \right)}_{I^{\ominus}} (L_+^2 + L_-^2) + \frac{1}{8} \underbrace{\left(\frac{1}{I_x} + \frac{1}{I_y} \right)}_{I^{\ominus}} \cdot 2L_+L_- - \frac{2L_z}{8} \underbrace{\left(\frac{1}{I_x} + \frac{1}{I_y} \right)}_{I^{\ominus}} + \frac{L_z^2}{2I_z}$$

[2]

(b) $H |l, m\rangle$ Dazu: • $L_+^2 |l, m\rangle \propto |l, m+2\rangle$

da $L_+ |l, m\rangle \propto |l, m+1\rangle$, $L_+ |l, m+1\rangle \propto |l, m+2\rangle$

• $L_-^2 |l, m\rangle \propto |l, m-2\rangle$

• $L_+ L_- |l, m\rangle \propto L_+ |l, m-1\rangle \propto |l, m\rangle$

• $L_- L_+ |l, m\rangle \propto |l, m\rangle$

Lin'komb.!

(A)

$\Rightarrow H |l, m\rangle = \alpha |l, m-2\rangle + \beta |l, m+2\rangle + \gamma |l, m\rangle$ $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{C}$

\Rightarrow alle m sind gerade / ungerade $\leadsto H |l, m\rangle$ bleibt
im selben UR. \mathcal{H}_l' bzw. \mathcal{H}_l'' . (D.h. l bleiben
gleich!)

(*) $H |l, m\rangle$ lässt sich als Linearkombination in

$$\langle |l, m\rangle, |l, m+2\rangle, |l, m-2\rangle \rangle$$

darstellen; alle diese l.u. Vektoren gehören
entweder in \mathcal{H}_l' oder \mathcal{H}_l'' ; je nach dem,
ob m gerade oder ungerade ist.

[2]

(c)

1. \mathcal{H} wird in $\mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_0^\perp$ aufgespalten, weil H, U auf \mathcal{H} keine Verwindungen haben!
2. Weiter teilt H jeden \mathcal{H}_0 in \mathcal{H}_0^+ , \mathcal{H}_0^- auf (\leadsto s. (b)).
3. \exists : U teilt $\mathcal{H}_0^+ = \mathcal{H}_{0,+}^+$, $\mathcal{H}_{0,-}^+$ auf
 (U lässt \mathcal{H}_0^+ invariant, da $|l, m\rangle \xrightarrow{U} |l, -m\rangle \cdot (-1)^{l-m} \propto |l, -m\rangle$
 und wenn m ~~gerade~~ ungerade ist, ist auch $-m$ ungerade!)

Für festes l def. Basis \mathcal{B}_l von \mathcal{H}_l als

$$\{|l, m\rangle \mid m = -l, \dots, l\} = \mathcal{B}_l$$

Es muss gelten $|l, m\rangle \xrightarrow{U} (-1)^{l-m} |l, -m\rangle$, also in der o.g. Basis

muss gelten:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{A_{lm}} (-1)^{l-m} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

A : 2×2 -Matrix, ℓ reell.

$$\Rightarrow A_{lm} = (-1)^{l-m} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

wobei man die Basis diagonalisiert erhält in

$$\{|l, m\rangle, |l, -m\rangle\} \cup \{|l, m+1\rangle, |l, m-1\rangle\} \cup \dots \cup \{|l, 0\rangle\} = \tilde{\mathcal{B}}_l$$

und A die Abbildungsmatrix für jede einzelne Teilmenge ist.

Sortiert man die Basisvektoren wie in $\tilde{\mathcal{B}}_l$, erhält man als Abbildungsmatrix \mathcal{A} von \mathcal{H}_l :

$$A_l = \begin{pmatrix} (-1)^{l-m} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & 0 & 0 \\ 0 & (-1)^{l-m-1} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ 0 & 1 & \dots \end{pmatrix}$$

Diese Matrix hat Blockgestalt. Will man sie diagonalisieren, kann man die einzelnen Blöcke diagonalisieren:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \leadsto \text{diag.}: \left| \begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix} \right| = 0 \Rightarrow \lambda = 1, \lambda = -1 \text{ als Eigenwerte}$$

$$\text{Mit Eigenvektoren } \lambda_1 \mapsto \underline{x}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \lambda_2 \mapsto \underline{x}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Damit haben wir den Operator U diagonalisiert in der

$$\text{Eigenbasis} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}} (|l, m\rangle + |l, -m\rangle)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}} (|l, m\rangle - |l, -m\rangle)$$

wobei in dieser A U die Matrixdarstellung hat.

Die neuen Basisvektoren sind l.u., weil $|l, m\rangle, |l, -m\rangle$ l.u. waren (sie sind sogar orthonormal!).

$$\begin{pmatrix} \begin{matrix} \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} \end{matrix} & \begin{matrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{matrix} \\ \begin{matrix} \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} \end{matrix} & \begin{matrix} \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} \end{matrix} \end{pmatrix}$$

\mathcal{H}_l wird damit aufgespalten in

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{l+} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (|l, m\rangle + |l, -m\rangle) \mid m = -l, \dots, +l \right\rangle \\ \mathcal{H}_{l-} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}} (|l, m\rangle - |l, -m\rangle) \mid \text{---} \right\rangle \end{aligned}$$

und wie oben gezeigt (2(b), 2(c) 1.-3.) werden diese Räume von H wieder in \mathcal{H}_{l+} je zwei UR für gerade (\mathcal{H}_{l+}'') und ungerade (\mathcal{H}_{l+}') l zerlegt. \square

Es war noch zu zeigen: $[L^2, U] = 0$. Dies gilt,

weil $[L^2, L_y] = 0$ und U in algebraischer

Form $U = \sum_j \frac{1}{j!} (-i \pi \frac{L_z}{\hbar})^j$ ist, also Terme

mit L_z^j vorkommen; dass kann man schreiben

$$\text{als } [L^2, L_z^j] = -[L_z^j, L^2] = -L_z^{j-1} \underbrace{[L_z, L^2]}_0 - [L_z^{j-1}, L^2] L_z$$

und iterativ so weiter...

✓

12)

(d)

Allgemein: Die Vorfaktoren von L_+, L_-, L_z :

$$L_+ |l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} |l, m+1\rangle$$

$$L_- |l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} |l, m-1\rangle$$

$$L_z |l, m\rangle = m \hbar |l, m\rangle$$

$$L_+^2 |l, m\rangle = \hbar^2 \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} \sqrt{l(l+1) - (m+1)(m+2)} |l, m+2\rangle$$

$$L_-^2 |l, m\rangle = \hbar^2 \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \sqrt{l(l+1) - (m-1)(m-2)} |l, m-2\rangle$$

$$L_z^2 |l, m\rangle = \hbar^2 m^2 |l, m\rangle$$

$$L_+ L_- |l, m\rangle = \hbar^2 \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} \sqrt{l(l+1) - (m-1)(m-2)} |l, m\rangle$$

Als Eigenwertverwendet ist die z & c.

Die A Eigenwert $\sim U$, und die $[U, K] = 0$ sich EB.

z. H.

Für H verwendet ist die Gl. 27 & a.

2(d)

$$\lambda(\lambda+1) = 2$$

$$\underline{\underline{\lambda = 1}}$$

• Ergebnis =

$$\begin{aligned} \bullet H |1, 1, 1\rangle &= \frac{1}{8} I^+ (0 + 0) + \frac{1}{4} I^+ \cdot 0 - \frac{1}{4} t_z I^+ m_z |1, 1\rangle + \frac{t_z^2}{2I_z} |1, 1\rangle \\ &= \left(\frac{t_z^2 m^2}{2I_z} - \frac{t_z^2 m}{4(I_x + I_y)} \right) |1, 1\rangle = \left(\frac{t_z^2}{2I_z} - \frac{t_z^2}{4(I_x + I_y)} \right) |1, 1\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bullet H |1, 0, 0\rangle &= \frac{1}{8} I^+ (0 + 0) + \frac{1}{4} I^+ \cdot 0 - \frac{1}{4} t_z I^+ m_z |1, 0\rangle + \frac{t_z^2}{2I_z} |1, 0\rangle \\ &= \left(\frac{t_z^2 m^2}{2I_z} - \frac{t_z^2 m}{4(I_x + I_y)} \right) |1, 0\rangle = 0 \cdot |1, 0\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bullet H |1, -1\rangle &= \frac{1}{8} I^+ (0 + 0) + \frac{1}{4} I^+ \cdot 0 - \frac{1}{4} t_z I^+ (-1) m_z |1, -1\rangle + \frac{t_z^2}{2I_z} |1, -1\rangle \\ &= \left(\frac{t_z^2}{2I_z} + \frac{t_z^2}{4(I_x + I_y)} \right) |1, -1\rangle \end{aligned}$$

Die waren die bel. für Eigenzustände, jetzt kommen speziell die für Eigenzustände:

$$\bullet H (|1, 1\rangle + |1, -1\rangle) = \left(\frac{t_z^2}{2I_z} - \frac{t_z^2}{4I_z} \right) |1, 1\rangle + \left(\frac{t_z^2}{2I_z} + \frac{t_z^2}{4I_z} \right) |1, -1\rangle$$

$$L=3 \quad l(l+1) = 12$$

$$\begin{aligned}
 \bullet H | 3, -3 \rangle &= \frac{1}{8} I^+ \left(\hbar^2 \sqrt{6} + \hbar^2 0 \right) + \frac{1}{4} I^+ \cdot 0 - \frac{1}{4} \hbar I^+ (-3) \hbar + \frac{9 \hbar^2}{2 I_z} | 3, -3 \rangle \\
 \bullet H | 3, 3 \rangle &= \frac{1}{8} I^+ (0 + \hbar^2 \sqrt{6}) + \frac{1}{4} I^+ \cdot \hbar^2 \sqrt{6} | 3, 3 \rangle - \frac{1}{4} \hbar I^+ 3 \hbar | 3, 3 \rangle \\
 &\quad + \frac{9 \hbar^2}{2 I_z} | 3, 3 \rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \bullet H | 3, -2 \rangle &= \frac{1}{8} I^+ (0 + 0) + \frac{1}{4} I^+ 6 \hbar^2 | 3, -2 \rangle - \frac{1}{4} \hbar I^+ \hbar (-2) | 3, -2 \rangle \\
 &= \frac{1}{8} \left(\frac{8 \hbar^2 I^+}{2} + \frac{2 \hbar^2}{I_z} + \frac{\hbar^2 I^+}{2} \right) | 3, -2 \rangle = \\
 &= \left(2 \hbar^2 I^+ + \frac{2 \hbar^2}{I_z} \right) | 3, -2 \rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \bullet H | 3, 2 \rangle &= \frac{1}{8} I^+ (0 + 0) + \frac{1}{4} I^+ \cdot 10 \hbar^2 | 3, 2 \rangle - \frac{1}{4} \hbar I^+ 2 \cdot \hbar | 3, 2 \rangle + \frac{4 \hbar^2}{2 I_z} | 3, 2 \rangle \\
 &= \left(\frac{5}{2} \hbar^2 I^+ + \frac{2 \hbar^2}{I_z} - \frac{\hbar^2 I^+}{2} \right) | 3, 2 \rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \bullet H | 3, -1 \rangle &= \frac{1}{8} I^+ (\hbar^2 \sqrt{6} | 3, -3 \rangle + \frac{1}{4} I^+ 10 \hbar^2 | 3, -1 \rangle - \frac{1}{4} \hbar I^+ (-1) \cdot \hbar | 3, -1 \rangle \\
 &\quad + \frac{1 \cdot \hbar^2}{2 I_z} | 3, -1 \rangle
 \end{aligned}$$

$$\bullet H | 3, 1 \rangle = \frac{1}{8} I^+ (\sqrt{6} \hbar | 3, 3 \rangle + 0) + \frac{1}{4} I^+ \cdot 0 - \frac{1}{4} \hbar I^+ 1 \cdot \hbar | 3, 1 \rangle + \frac{1 \cdot \hbar^2}{2 I_z} | 3, 1 \rangle$$

$$\bullet H | 3, 0 \rangle = \frac{1}{8} I^+ (0 + 0) - \frac{1}{4} I^+ \cdot 0 - 0 + 0 = 0 | 3, 0 \rangle$$

2(1)

$l=1$

Bestimmung der Eigenbasis; dazu: Hamilton im Rotationsdiagonalisieren, $(1,1,0)$ wird als orthogonale Eigenfunktion sein.

Matr $H \leftrightarrow (A_{ij})$ $A_{ij} = \langle 1,1,i | H | 1,1,j \rangle$ $a_{ij} = -1, 0, 1$

$$(A_{ij}) = \begin{pmatrix} \frac{t^2}{2I_2} + \frac{t^2}{4I^+} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{t^2}{2I_2} - \frac{t^2}{4I^+} \end{pmatrix}$$

so H ist diagonal, hat die EB $\{ |1,1,1\rangle, |1,1,-1\rangle, |1,1,0\rangle \}$ mit den zugeh. EW.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{t^2}{2I_2} + \frac{t^2}{4I^+} \\ \frac{t^2}{2I_2} - \frac{t^2}{4I^+} \end{array} \right.$$

$l=3$ Analog:

$$A_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{9t^2}{2I_2} + \frac{3}{4}t^2I^+ & 0 & \frac{\sqrt{15}}{4}I^+I^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2t^2(I^+ + \frac{1}{I_2}) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{15}}{4}I^+I^+ & 0 & \frac{t^2}{2I_2} + \frac{5}{2}t^2I^+ + \frac{t^2}{4}I^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{t^2}{2I_2} - \frac{t^2}{4}I^+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{5t^2}{2} + \frac{t^2}{I_2} - \frac{t^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{15}t^2I^+}{4} \end{pmatrix}$$

(3) (a) Ges.: $H = -\frac{\hbar^2 \rho^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2 \rho^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2) + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2 + z^2)$

$= H_x + H_y + H_z$

SG.: $H\tilde{\Psi} = E\tilde{\Psi}$ $\tilde{\Psi} = \Psi(r) \chi(t)$
 $= -i\hbar \partial_t \tilde{\Psi} = \Psi(r) \cdot (-i\hbar \partial_t \chi(t)) = E \cdot \Psi(r) \cdot \chi(t)$
 $\Rightarrow \chi(t) = e^{iEt/\hbar}$

$\Rightarrow \hat{H}\Psi = E\Psi$

Ansatz $\Psi = \Psi_x(x) \cdot \Psi_y(y) \cdot \Psi_z(z)$

$H\Psi = (H_x + H_y + H_z)\Psi \Rightarrow \Psi_y \Psi_z H_x \Psi_x + \Psi_x \Psi_z H_y \Psi_y + \Psi_x \Psi_y H_z \Psi_z = E \cdot \Psi$

Bekannt: $H_x \Psi_x = E_x \Psi_x$ gilt für harmon. Osz.

$\Rightarrow E_x \Psi + E_y \Psi + E_z \Psi = E \cdot \Psi$

$\Rightarrow E = (E_x + E_y + E_z)$

Nach Born-Sommerfeld: $E_x = (n_x + \frac{1}{2}) \omega \hbar$

$n_i = 0, 1, \dots, N$

$\Rightarrow E = \underbrace{(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) \omega \hbar}_N$

D_N : Anzahl von Kombinationen der n_i , da $\sum n_i = N$

$\Phi_N = \frac{(N+3)!}{2}$

N	D_N
0	1
1	3
2	6
3	10
4	15
...	...

(b) $\Delta = \partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$

$\hookrightarrow H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r) - \frac{L^2}{2mr^2} + \frac{m\omega^2 r^2}{2}$

$[H, L^2] = 0$ da $[\partial_r, L^2] = 0$ da L Abl. op. und φ, θ ist:

$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\varphi^2 + \frac{1}{\sin \theta} \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) \right]$

Oder $[H, L_z] = 0$ da $L_z = \frac{\hbar}{i} \partial_\varphi$

(c) $H\Psi = E\Psi \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r) \cdot \frac{x_\ell(r)}{r} \Psi - \frac{x_\ell(r)}{r} \cdot \frac{L^2 \Psi}{2mr^2} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} \cdot \frac{x_\ell(r)}{r} \Psi = E \cdot \frac{x_\ell(r)}{r} \Psi$
 $-\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r) \frac{x_\ell(r)}{r} = \frac{x_\ell(r)}{r} \cdot \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} x_\ell(r) + E \frac{x_\ell(r)}{r} \cdot \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \Psi$

$$\partial_r^2 (x r^{-1}) = \partial_r \partial_r (x r^{-1}) = \partial_r [(\partial_r x) \cdot r^{-1} - x r^{-2}]$$
$$= (\partial_r^2 x) r^{-1} - (\partial_r x) r^{-2} - \partial_r x r^{-2} + 2 x r^{-3}$$

$$\frac{2}{r} \partial_r (x r^{-1}) = \frac{2}{r} [(\partial_r x) r^{-1} - x r^{-2}] = \frac{2 (\partial_r x)}{r^2} - \frac{2 x}{r^3}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial_r^2 x_e(r)}{r} = \frac{x_e(r)}{r} \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} + \frac{m \omega^2 r^2}{2} + E \right)$$

(A) $\underline{r \rightarrow \infty}$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\partial_r^2 - \frac{m^2 \omega^2 r^2}{\hbar^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] x_e = 0$$

Ansatz: $x_e = A \cdot e^{-B r^2/2}$

$$\partial_r x_e = -AB r e^{-B r^2/2}$$
$$\partial_r^2 x_e = -AB e^{-B r^2/2} + AB^2 r^2 e^{-B r^2/2}$$

$$\left[-B^2 + \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} r^2 - \frac{2mE}{\hbar^2} \right] = 0$$

$$\Rightarrow B^2 = + \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} \Rightarrow B = \frac{m \omega}{\hbar}$$
$$B = - \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{m \omega}{\hbar} \quad E = + \frac{1}{2} \hbar \omega$$

$r \rightarrow 0$ Nur Teil mit $1/r$ betr., da d'ann divergiert

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\partial_r^2 + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] x_e = 0$$

Ansatz: $x = r^{l+1}$

$$\partial_r x = (l+1) r^l$$
$$\partial_r^2 x = l(l+1) r^{l-1} / r^2$$

(d)

Potenzreihenansatz mit Betrachtung $r \rightarrow \infty$.

DGL für $r \rightarrow \infty$ ist: (Nur wichtigste Term betr.)

$$\left[\partial_r^2 - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} r^2 \right] x_0 = 0$$

Lösungen sind

$$x_1 = e^{-Ar^2/2}$$

Ansatz

~~$x_2 = r^2 x_1$~~

$$\partial_r^2 x_1 = \partial_r (\partial_r x_1) = \partial_r (-Ar e^{-Ar^2/2}) = -Ar^2 e^{-Ar^2/2} - A e^{-Ar^2/2}$$

$$\Rightarrow -Ar^2 e^{-Ar^2/2} - A e^{-Ar^2/2} - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} r^2 e^{-Ar^2/2} = 0 \Rightarrow$$

Wird entscheidend, da r groß.

$$\Rightarrow A = \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} \Rightarrow A = \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2}$$

$e^{-Ar^2/2}$ ist die "Grenzform" für $r \rightarrow \infty$.

Wir verwenden sie als "Einwickelnde" der eigentlichen

Lösung: $x_2(r) = e^{-Ar^2/2} \cdot \chi(r)$

Setzt man das in die vollständige DGL

$$\left[\partial_r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} r^2 + E \right] x_2 = 0$$

ein, erhält man für χ die folgende Bed.:

$$\begin{aligned} \partial_r^2 (x_2) &= \partial_r (\partial_r x_2) = \partial_r [\partial_r (e^{-Ar^2/2} \chi(r))] = \partial_r [-Ar e^{-Ar^2/2} \chi(r) + e^{-Ar^2/2} \partial_r \chi(r)] \\ &= -A e^{-Ar^2/2} \chi(r) + \underbrace{Ar^2 e^{-Ar^2/2} \chi(r)}_{\text{verschwindet}} - Ar e^{-Ar^2/2} \partial_r \chi(r) - A e^{-Ar^2/2} \partial_r^2 \chi(r) \end{aligned}$$

~~nach Division mit $e^{-Ar^2/2}$~~

$$-A \chi - Ar \partial_r \chi - (Ar + A r^2) \partial_r \chi$$

$$\partial_r^2 (x_2) = \underbrace{Ar^2 \chi}_{\text{verschwindet mit (2)}} - 2Ar \partial_r \chi - A \chi + (\partial_r^2 \chi) \cdot e^{-Ar^2/2}$$

$$\Rightarrow \partial_r^2 \chi - 2Ar \partial_r \chi + \left[-A - \frac{l(l+1)}{r^2} + E \right] \chi = 0 \quad (\diamond)$$

Da in Physik alle Funktionen ~~to~~ in Potenzreihe
entwickelbar sind, wähle ich die Ansatz:

$$\chi(r) = r^k \sum_{i=0}^{\infty} \alpha_i r^i \quad \text{mit best. } k \text{ und } \alpha_0 \neq 0!$$

$\alpha_0 + \alpha_1 r + \alpha_2 r^2 + \alpha_3 r^3$

Setzt Daraus finde ich Abl. und setze sie in (\diamond) ein:

$$\begin{aligned} \partial_r^2 \chi &= \partial_r(r\chi) = \partial_r \left[k r^{k-1} \sum + r^k \sum_{i=0}^{\infty} i \alpha_i r^{i-1} \right] \\ &= k(k-1) r^{k-2} \sum + k r^{k-1} \sum' + r^k \sum_{i=0}^{\infty} i(i-1) \alpha_i r^{i-2} \end{aligned}$$

$\sum': \alpha_1 + 2\alpha_2 r + 3\alpha_3 r^2 + \dots$
 $\sum'': 2\alpha_2 + 6\alpha_3 r + \dots$

$$(\star) \quad k(k-1) r^{k-2} \sum + 2k r^{k-1} \sum' + r^k \sum'' - 2Ar(k r^{k-1} \sum + r^k \sum') + [-A - \frac{l(l+1)}{r^2} + E] r^k \sum = 0$$

Die niedrigste Potenz von r ist $(k-2)$.

Betrachte alle Terme in r^{k-2} (Nur Koeff.)

$$k(k-1)\alpha_0 + 2k\alpha_0 + 0 - 2Ar(0 + 0) + [0 - l(l+1)\alpha_0 + 0] = 0$$

$\alpha_0 \neq 0$ teilt durch!

Da $\alpha_0 \neq 0$ teilt durch:

$$k(k-1) - l(l+1) = 0 \Rightarrow \boxed{k = l+1}$$

In (\star) betrachte wir nun Terme mit Potenz von $r: k-1 = l$:

$$k(k-1)\alpha_1 + 2k\alpha_1 + 0 - 2A(0\alpha_0) + [0 - l(l+1)\alpha_1 + 0] = 0$$

$$\underbrace{[k(k-1) + 2k - l(l+1)]}_{\text{zuerst}} \alpha_1 = 0 \Rightarrow \alpha_1 = 0 \quad \text{da } k \neq 0.$$

In (\star) betr. folg. Blatt. d. Potenz $k+2 = l+3$:

$$[(l+3+2)(l+3+1) - l(l+1)] \alpha_{l+2} + [-2A(l+2) - A + E] \alpha_l$$

von drüben
weiter nehmen
rückwärts!

Wg. $k = l+1$ folgt die Relation:

$$(l+2)(l+3)\alpha_{l+2} = [(2l+2l+3) - E] \alpha_l$$

Mit bekannten α_0, α_1 kann man alle Koeff. bestimmen! (w. $\alpha_i = 0$ für i ungerade)

Da ist die Potenzreihe bei $l=0$ Term abbrecht,
 wir setzen: $a_{l+2} = 0 \Rightarrow$

$$(2q + 2l + 3) \cdot A_{\frac{m\omega}{\hbar}} = E \Rightarrow Q \left(\underbrace{l+l}_{N} + \frac{3}{2} \right) \frac{\hbar\omega}{4} = E/2$$

Dies definiert Energie & Entartung! $q, l \in \mathbb{N}$.

$N=0$	$q=l$	$D_N = 1$
$N=1$		$D_N = 2$
$N=2$		$D_N = 3$
$N=3$		$D_N = 4$
$N=4$		$D_N = 5$
		\vdots
		$D_N = \underline{\underline{N+1}}$

$$\begin{array}{c} \equiv \\ \equiv \\ \equiv \\ \equiv \end{array}$$

$$\begin{array}{c} \equiv \\ \equiv \\ \equiv \\ \equiv \\ \equiv \end{array}$$

2d – Matrix diagonalisieren ...

Die Matrix fuer H ist A ; sie ist diagonalisiert via:

Maxima 5.13.0 <http://maxima.sourceforge.net>

Using Lisp GNU Common Lisp (GCL) GCL 2.6.8 (aka GCL)

Distributed under the GNU Public License. See the file COPYING.

Dedicated to the memory of William Schelter.

This is a development version of Maxima. The function bug_report()
provides bug reporting information.

(%i1) A :

matrix([9/(2*Iz)+(3*(1/Iy+1/Ix))/4,0,(sqrt(15)*(1/Iy+1/Ix))/4,0,0,0],[0,2*(1/Iz+1/Iy+1/Ix),
(1/Iy+1/Ix)/4,0,(sqrt(15)*(1/Iy+1/Ix))/4],[0,0,0,0,2/Iz+2*(1/Iy+1/Ix),0],[0,0,0,(sqrt(15)*

(%o1)

$$\begin{pmatrix} \frac{9}{2Iz} + \frac{3\left(\frac{1}{Iy} + \frac{1}{Ix}\right)}{4} & 0 & \frac{\sqrt{15}\left(\frac{1}{Iy} + \frac{1}{Ix}\right)}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\left(\frac{1}{Iz} + \frac{1}{Iy} + \frac{1}{Ix}\right) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{15}\left(\frac{1}{Iy} + \frac{1}{Ix}\right)}{4} & 0 & \frac{1}{2Iz} + \frac{11\left(\frac{1}{Iy} + \frac{1}{Ix}\right)}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2Iz} - \frac{\frac{1}{Iy} + \frac{1}{Ix}}{4} & 0 & \frac{\sqrt{15}\left(\frac{1}{Iy} + \frac{1}{Ix}\right)}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{Iz} + 2\left(\frac{1}{Iy} + \frac{1}{Ix}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{15}\left(\frac{1}{Iy} + \frac{1}{Ix}\right)}{4} & 0 & \frac{9}{2Iz} + \frac{3\left(\frac{1}{Iy} + \frac{1}{Ix}\right)}{4} \end{pmatrix}$$

(%i2) eigenvalues(A);

(%o2) $\left[\begin{array}{l} - \\ \end{array} \right]$

$$\begin{aligned} & \frac{\sqrt{(19Iy^2 + 38IxIy + 19Ix^2)Iz^2 + (32IxIy^2 + 32Ix^2Iy)Iz + 64Ix^2Iy^2 + (-Iy - Ix)Iz - 10IxIy}}{4IxIyIz}, \\ & \frac{\sqrt{(19Iy^2 + 38IxIy + 19Ix^2)Iz^2 + (32IxIy^2 + 32Ix^2Iy)Iz + 64Ix^2Iy^2 + (Iy + Ix)Iz + 10IxIy}}{4IxIyIz}, - \\ & \frac{\sqrt{(31Iy^2 + 62IxIy + 31Ix^2)Iz^2 + (-64IxIy^2 - 64Ix^2Iy)Iz + 64Ix^2Iy^2 + (-7Iy - 7Ix)Iz - 10IxIy}}{4IxIyIz}, \\ & \frac{\sqrt{(31Iy^2 + 62IxIy + 31Ix^2)Iz^2 + (-64IxIy^2 - 64Ix^2Iy)Iz + 64Ix^2Iy^2 + (7Iy + 7Ix)Iz + 10IxIy}}{4IxIyIz}, \\ & \left. \frac{Ix(2Iz + 2Iy) + 2IyIz}{IxIyIz} \right], [1, 1, 1, 1, 2] \end{aligned}$$

(%i3) eigenvectors(A);

$$\begin{aligned}
& \left(\%o4 \right) \left[\left[\left[\begin{aligned} & \frac{\sqrt{(19 I_y^2 + 38 I_x I_y + 19 I_x^2) I_z^2 + (32 I_x I_y^2 + 32 I_x^2 I_y) I_z + 64 I_x^2 I_y^2 + (- I_y - I_x) I_z - 10 I_x I_y}}{4 I_x I_y I_z}, \\ & \frac{\sqrt{(19 I_y^2 + 38 I_x I_y + 19 I_x^2) I_z^2 + (32 I_x I_y^2 + 32 I_x^2 I_y) I_z + 64 I_x^2 I_y^2 + (I_y + I_x) I_z + 10 I_x I_y}}{4 I_x I_y I_z}, - \\ & \frac{\sqrt{(31 I_y^2 + 62 I_x I_y + 31 I_x^2) I_z^2 + (- 64 I_x I_y^2 - 64 I_x^2 I_y) I_z + 64 I_x^2 I_y^2 + (- 7 I_y - 7 I_x) I_z - 10 I_x I_y}}{4 I_x I_y I_z}, \\ & \frac{\sqrt{(31 I_y^2 + 62 I_x I_y + 31 I_x^2) I_z^2 + (- 64 I_x I_y^2 - 64 I_x^2 I_y) I_z + 64 I_x^2 I_y^2 + (7 I_y + 7 I_x) I_z + 10 I_x I_y}}{4 I_x I_y I_z}, \\ & \frac{I_x (2 I_z + 2 I_y) + 2 I_y I_z}{I_x I_y I_z} \end{aligned} \right], [1, 1, 1, 1, 2] \right], \left[\begin{aligned} & 0, 0, 0, 1, 0, \\ & - \frac{\sqrt{19 I_y^2 I_z^2 + 38 I_x I_y I_z^2 + 19 I_x^2 I_z^2 + 32 I_x I_y^2 I_z + 32 I_x^2 I_y I_z + 64 I_x^2 I_y^2} + (2 I_y + 2 I_x) I_z + 8 I_x I_y}{\left(\sqrt{3} \sqrt{5} I_y + \sqrt{3} \sqrt{5} I_x \right) I_z} \end{aligned} \right], \\ & \left[\begin{aligned} & 0, 0, 0, 1, 0, \\ & \frac{\sqrt{19 I_y^2 I_z^2 + 38 I_x I_y I_z^2 + 19 I_x^2 I_z^2 + 32 I_x I_y^2 I_z + 32 I_x^2 I_y I_z + 64 I_x^2 I_y^2} + (2 I_y + 2 I_x) I_z + 8 I_x I_y}{\left(\sqrt{3} \sqrt{5} I_y + \sqrt{3} \sqrt{5} I_x \right) I_z} \end{aligned} \right], \\ & \left[\begin{aligned} & 1, 0, - \\ & \frac{\left(\sqrt{3} \sqrt{5} I_y + \sqrt{3} \sqrt{5} I_x \right) I_z}{\sqrt{31 I_y^2 I_z^2 + 62 I_x I_y I_z^2 + 31 I_x^2 I_z^2 - 64 I_x I_y^2 I_z - 64 I_x^2 I_y I_z + 64 I_x^2 I_y^2} + (4 I_y + 4 I_x) I_z - 8 I_x I_y} \end{aligned} \right], \\ & 0, 0, 0 \right], \left[\begin{aligned} & 1, 0, - \\ & \frac{\left(\sqrt{3} \sqrt{5} I_y + \sqrt{3} \sqrt{5} I_x \right) I_z}{-\sqrt{31 I_y^2 I_z^2 + 62 I_x I_y I_z^2 + 31 I_x^2 I_z^2 - 64 I_x I_y^2 I_z - 64 I_x^2 I_y I_z + 64 I_x^2 I_y^2} + (4 I_y + 4 I_x) I_z - 8 I_x I_y} \end{aligned} \right], \\ & 0, 0, 0 \right], [0, 1, 0, 0, 0, 0], [0, 0, 0, 0, 1, 0] \right]
\end{aligned}$$

(%i5)

Die Matrix nimmt in dieser Basis Diagonalgestalt an...

Bemerkung: Die Hier aufgefuehrten Eigenvektoren sind lediglich die Koeffizienten, mit der die $|3, m\rangle$ dargestellt werden; bspw. wird ein Vektor $[a, b, c, d, e, f]$ von oben dem Ket-Vektor

$$a |3, -1\rangle + b |3, -2\rangle + c |3, -1\rangle + d |3, 1\rangle + e |3, 2\rangle + f |3, 3\rangle$$

zugeordnet ...

