Übung 11

Ausgabe: 01.07.2014, Abgabe: 08.07.2014, Besprechung: 10./11.07.2014

11.1 Radialimpuls

Die klasssiche Definition des Radialimpulses $p_r^{kl} = \frac{1}{r}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p})$, wobei $\mathbf{R}$ der Koordinatenvektor ist, muss in der Quantenmechanik wegen der Nicht-Vertauschbarkeit der Operatoren $\hat{\mathbf{r}}$ und $\hat{\mathbf{p}}$ symmetrisiert werden:

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{\mathbf{r}}}{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \frac{\hat{\mathbf{r}}}{r}\right) . \tag{1}$$

1. Zeigen Sie, dass für den Radialimpuls gilt:

$$\hat{p}_r = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r\, . \tag{2}$$

2. Verifizieren Sie, dass $\hat{p}_r$ der zu $\hat{r} = |\mathbf{r}|$ kanonisch konjugierte Impuls ist.
3. Zeigen Sie, dass $\hat{p}_r$ hermitesch ist. Welche Bedingungen sind dazu an die Wellenfunktionen zu stellen?
Hinweis: Beachten Sie, dass der Radialanteil des Volumenintegrals in Kugelkoordinaten geschrieben wird als $\int_0^\infty r^2 dr$.
4. Begründen Sie, warum der Radialimpuls $\hat{p}_r$ nicht als Observable interpretiert werden kann.
Hinweis: Untersuchen Sie dazu das Eigenwertproblem des Operators $\hat{p}_r$.
5. Verifizieren Sie mit der allgemeinen Definition des Bahndrehimpuls $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ die folgenden Operatoridentitäten:
   (a) $\hat{\mathbf{L}}^2 = i\hbar(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \hat{\mathbf{r}}^2\hat{\mathbf{p}}^2 - (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^2$;
   (b) $\hat{p}_r = \frac{1}{r}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}$;
   (c) $\hat{\mathbf{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + \frac{1}{r^2}\hat{\mathbf{L}}^2$.

11.2 Kugelflächenfunktionen in kartesischen Koordinaten

Die Kugelflächenfunktionen können durch

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N_{lm} P_{lm} \cos\theta e^{im\phi} \tag{3}$$

mit

$$P_{lm}(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!}(1-x^2)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}(x^{-}1)^l\, , \qquad N_{lm} = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \tag{4}$$

berechnet werden. Geben Sie eine Darstellung der Funktionen $r^l Y_{lm}(\theta, \phi)$ für $l = 0, 1$ und $m = -l, \ldots, l$ in Kugelkoordinaten sowie in den kartesischen Koordinaten

$$x = r\sin\theta\cos\phi\, , \qquad y = r\sin\theta\sin\phi\, , \qquad z = r\cos\theta \tag{5}$$

an.

11.3 Zentralpotential mit Korrektur

Berechnen Sie die Eigenenergien im Zentralpotential

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hat{c}}{r^2} \qquad \text{mit} \qquad \hat{c} = \frac{\hbar^2}{2m_e}c\, , \tag{6}$$

wobei c eine dimensionslose Konstante (und nicht die Lichtgeschwindigkeit!) ist. Der zweite Summand soll eine schwache Korrektur zum eigentlichen Coulomb-Potential darstellen ($c \ll 1$). Zeigen Sie, dass dieser Zusatzterm die zufällige Entartung des Coulomb-Potentials bezüglich der Drehimpulsquantenzahl l aufhebt. Gehen Sie hierfür am besten wie folgt vor:

1. Gehen Sie von er allgemeinen, zeitunabhänigigen Schrödingergleichung
$$\left[\frac{1}{2m_e}\left(\hat{p}_r^2+\frac{1}{r^2}\hat{\mathbf{L}}^2\right)+V(\hat{r})\right]\Psi(\mathbf{r})=\mathbf{E}\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{r}) \tag{7}$$
aus und leiten Sie daraus mit den Ergebnissen aus Aufgabe 11.1 die Radialgleichung
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2}{dr^2}-\frac{Z}{4\pi}\frac{e^2}{\epsilon_0 r}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2}+\frac{\hat{c}}{r^2}-E\right)u(r)=0 \tag{8}$$
für $u(r)=rR(r)$ ab. *Hinweis*: Dieser Schritt folgt der Behandlung der Vorlesung.

2. Zeigen Sie, dass sich diese Gleichung schreiben lässt als
$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{\lambda}{\rho}-\frac{l'(l'+1)}{\rho^2}-\frac{1}{4}\right]u(\rho)=0 \tag{9}$$
mit $l'(l'+1)=l(l+1)+c$. Diese Gleichung ist formal identisch mit der in der Vorlesung hergeleiteten Gleichung für ungestörtes Coulombpotential und lässt sich daher analog lösen. In der Vorlesung hatten wir gesehen, dass $u(\rho)$ mit Potenz ρ^{l+1} beginnt; niedrigere Potenzen von ρ treten nicht auf. Wir machen daher den Ansatz
$$u(\rho)=\mathrm{e}^{-\rho/2}\rho^{l'+1}f(\rho), \tag{10}$$
und entwickeln $f(\rho)$ in eine Potenzreihe,
$$f(\rho)=\sum_{i=0}^{\infty}A_i\rho^i \tag{11}$$
Diese Reihe muss nach endlich vielen Termen abbrechen. Zeigen Sie, dass dies auf die Bedingung
$$\lambda=n'+l' \tag{12}$$
führt, mit $n'=1,2,\ldots$. *Hinweis:* Wie in der Vorlesung müssen Sie die Ansätze (10) und (11) sukzessive in die Schrödingergleichung (9) einsetzen.

3. Zeigen Sie, dass sich hieraus und im Limit $c\ll 1$ die Eigenenergien
$$E_{nl}\simeq-\frac{Z^2E_R}{\left(n+\frac{c}{2l+1}\right)^2} \tag{13}$$
ergeben, wobei $E_R=\frac{m_e e^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2}$ gilt. *Hinweis:* Schreiben Sie $n'+l'=n+l'-l$, wobei die Hauptquantenzahl n ebenfalls eine positive ganze Zahl ist.

11.4 Elektron im Wasserstoffatom

Es sei
$$\Psi(r,\theta,\varphi)=Are^{-r/(2a_0)}Y_{11}(\theta,\varphi)\,. \tag{14}$$
$a_0=\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ ist der Bohr'sche Radius, A ist eine Konstante (Normierung), und Y_{11} die Kugelflächenfunktion.

1. Zeigen Sie durch direktes Lösen der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung mit dem Hamiltonoperator
$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\,, \tag{15}$$
dass $\Psi(r,\theta,\varphi)$ Eigenfunktion für das (spinlose) Elektron im Wasserstoffatom ist.

2. Geben Sie den zugehörigen Energieeigenwert an.

3. Durch welche Quantenzahlen ist der Zustand des Elektrons gekennzeichnet?