Aufgabe 13: Virialsatz (6 Punkte)

In der klassischen Mechanik und der Thermodynamik haben Sie vermutlich das „Virial“ $\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$ kennengelernt. Damit lässt sich nach Aufgabe 41, EQM, durch Symmetrisierung ein analoger hermitescher Operator

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

konstruieren. Das Virial hat offensichtlich die Dimension einer Wirkung.

Sei nun der Hamiltonoperator $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ gegeben, dessen stationäre, gebundene Zustände der Eigenwertgleichung

$$\hat{H}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$$

genügen mögen.

a) Berechnen Sie den Kommutator $[\hat{A}, \hat{H}]$ und den Erwartungswert des Kommutators $\langle\psi|\,[\hat{A}, \hat{H}]\,|\psi\rangle$ in der Ortsdarstellung und leiten Sie daraus den Virialsatz

$$\boxed{\langle\hat{T}\rangle = \frac{1}{2}\,\langle\mathbf{r} \cdot \vec{\nabla}_{\mathbf{r}}\,V(\mathbf{r})\rangle}$$

ab. Geben Sie die zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes von $\hat{A}$ an.

b) Zeigen Sie, dass der Virialsatz für Potentiale der Form

$$V(r) = \gamma\, r^{\nu}$$

($V(r)$ ist homogene Funktion vom Grade ν) die folgende Form annimmt:

$$\langle\hat{T}\rangle = \frac{\nu}{2}\,\langle\hat{V}\rangle\ .$$

Was folgt daraus für

i) den eindimensionalen harmonischen Oszillator,

ii) den dreidimensionalen harmonischen Oszillator,

iii) das attraktive Coulomb-Potential?

Hinweis: $\langle\hat{H}\rangle = E$.

c) Zeigen Sie, dass die Erwartungswerte von $1/r$ in den gebundenen Zuständen des Wasserstoffatoms durch

$$\left\langle n\,l\,m\left|\frac{1}{r}\right|n\,l\,m\right\rangle = \frac{1}{a_B}\,\frac{1}{n^2}$$

gegeben sind. Warum hängen diese Erwartungswerte weder von l noch von m ab?

Aufgabe 14: Starrer Rotator und Drehimpulserwartungswerte (8 Punkte)

Ein diatomares Molekül kann als starre Hantel mit dem Trägheitsmoment I bezüglich seines Schwerpunktes aufgefasst werden, wenn man nur seine energetisch tiefsten Zustände – seine Rotationszustände – studieren möchte. Ein solches Hantelmodell rotiere um seinen Schwerpunkt mit den beiden dynamischen Freiheitsgraden ϑ und φ (starrer Rotator). Es werde beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2\,I} \ .$$

a) Geben Sie die Eigenwerte und Eigenfunktionen (in darstellungsfreier Dirac-Notation) des starren Rotators an und bestimmen Sie den Entartungsgrad g_l seiner Eigenzustände.

b) Berechnen Sie für beliebige Eigenzustände die Erwartungswerte $\langle \hat{L}_+ \rangle$, $\langle \hat{L}_- \rangle$, $\langle \hat{L}_+ \, \hat{L}_- \rangle$, $\langle \hat{L}_x \rangle$, $\langle \hat{L}_y \rangle$ und $\langle \hat{L}_z \rangle$.

c) Berechnen Sie die Produkte der Unschärfen

$$\sigma\,(L_i) \cdot \sigma\,(L_j) \equiv \Delta\, L_i \cdot \Delta\, L_j \qquad \text{für} \qquad i \neq j = x,\, y,\, z \ .$$

Ergibt sich hier ein Widerspruch zur Unschärferelation?

Aufgabe 15: Kugelfunktionen (10 Punkte)

Die Kugelfunktionen $Y_{lm}\,(\vartheta,\, \varphi)$ lassen sich mit Hilfe der Leiteroperatoren $\hat{L}_\pm$ und den Abbruchbedingungen berechnen. Gehen Sie dazu wie folgt vor:

a) Aus der Vorlesung kennen Sie $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ und $\hat{L}_z$ in Kugelkoordinaten. Stellen Sie $\hat{L}_\pm$ in Kugelkoordinaten dar.

b) Lösen Sie die Differentialgleichung

$$\hat{L}_z\, Y_{lm}\,(\vartheta,\, \varphi) = \hbar\, m\, Y_{lm}\,(\vartheta,\, \varphi) \ .$$

c) Berechnen Sie $Y_{ll}\,(\vartheta,\, \varphi) = \Theta_{ll}\,(\vartheta)\, \Phi_l\,(\varphi)$ unter Ausnutzung der Abbruchbedingung $\hat{L}_+\, Y_{ll} = 0$.

d) Berechnen Sie die Normierungskonstante $N_l = (-1)^l\, |N_l|$ (konventionsgemäße Wahl der Phase). *Hinweis*: Partielle Integration nach Substitution $x = \cos\,\vartheta$.

e) Berechnen Sie $Y_{lm}\,(\vartheta,\, \varphi)$ vermittels sukzessiver Anwendung von

$$\hat{L}_-\, Y_{lm}\,(\vartheta,\, \varphi) = \hbar\, \left\{ l\,(l+1) - m\,(m-1) \right\}^{\frac{1}{2}}\, Y_{l,\,m-1}\,(\vartheta,\, \varphi) \ .$$

Hinweis:

$$\left(\frac{d}{d\,\vartheta} + m \cdot \cot\vartheta \right)\, f\,(\vartheta) = \frac{1}{(\sin\,\vartheta)^m}\, \frac{d}{d\,\vartheta}\, \left[(\sin\,\vartheta)^m\, f\,(\vartheta) \right] \ .$$