H. van Hees **Wintersemester 2024/2025**

Übungen zur Theoretischen Physik 3 für das Lehramt L3 Lösungen zu Blatt 7

Aufgabe 1 (10 Punkte): Bohrscher Radius

Wie in der Vorlesung gezeigt, sind die Energie-Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms durch

$$\psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!a_{\mathrm{B}}^3}}\left(\frac{2r}{na_{\mathrm{B}}}\right)^l \exp\left(-\frac{r}{na_{\mathrm{B}}}\right)\mathrm{L}_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_{\mathrm{B}}}\right)\mathrm{Y}_{lm}(\vartheta,\varphi). \tag{1}$$

gegeben. Die assoziierten Laguerre-Polynome $\mathrm{L}_{n_r}^k$ und die Kugelflächenfunktionen sind im Skript ausführlich erklärt. Dabei ist

$$a_{\mathrm{B}} = \frac{\hbar}{\alpha m_{\mathrm{e}} c} = 5{,}29177210903(80)\cdot 10^{-11}\,\mathrm{m}, \quad \alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = 7{,}2973525693(11)\cdot 10^{-3}. \tag{2}$$

Betrachten Sie nun den Grundzustand des Wasserstoffatoms mit den Quantenzahlen $n = 1$, $l = m = 0$. Zeigen Sie, dass (1) ordnungsgemäß normiert ist und berechnen Sie den mittleren Abstand zwischen Proton und Elektron.

Lösung: Zunächst vereinfacht sich (1) für $n = 1$ und $l = m = 0$ wegen Gln. (A.3.14) und (3.12.31) im Skript

$$\mathrm{L}_0^1(\xi) = \frac{1}{0!}\xi^{-1}\exp\xi\,\xi\,\exp(-\xi) = 1 = \text{const}, \quad \mathrm{Y}_{00}(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{3}$$

zu

$$\psi_{100}(r,\vartheta,\varphi) = \frac{2}{\sqrt{4\pi a_{\mathrm{B}}^3}}\exp\left(-\frac{r}{a_{\mathrm{B}}}\right). \tag{4}$$

Zunächst berechnen wir das Normierungsintegral:

$$\int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}^3x|\psi_{100}|^2 = \int_0^\infty \mathrm{d}r\int_0^\pi \mathrm{d}\vartheta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\, r^2\sin\vartheta|\psi_{100}|^2 = \frac{1}{\pi a_{\mathrm{B}}^3}4\pi\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^2\exp\left(-\frac{2r}{a_{\mathrm{B}}}\right) = 1. \tag{5}$$

Damit ergibt sich für den mittleren Abstand

$$\begin{aligned}\langle r\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3}\mathrm{d}^3x\, r|\psi_{100}|^2 = \int_0^\infty \mathrm{d}r\int_0^\pi\mathrm{d}\vartheta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\, r^3\sin\vartheta|\psi_{100}|^2 \\ &= \frac{1}{\pi a_{\mathrm{B}}^3}4\pi\int_0^\infty\mathrm{d}r\, r^3\exp\left(-\frac{2r}{a_{\mathrm{B}}}\right) = \frac{3}{2}a_{\mathrm{B}}.\end{aligned} \tag{6}$$

Zur Berechnung der obigen Integrale bemerken wir, dass wir mit der Funktion

$$f(\lambda) = \int_0^\infty \mathrm{d}r\exp(-\lambda r) = \frac{1}{\lambda}, \quad \lambda > 0, \tag{7}$$

diese Integrale einfach durch Ableitung nach λ berechnen können, denn offenbar ist

$$f'(\lambda) = \int_0^\infty \mathrm{d}r(-r)\exp(-\lambda r), \quad f''(\lambda) = \int_0^\infty \mathrm{d}r(-r)^2\exp(-\lambda r) \tag{8}$$

bzw. allgemein für die n-te Ableitung

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\lambda^n} f(\lambda) = \int_0^\infty \mathrm{d}r (-r)^n \exp(-\lambda r). \tag{9}$$

Demnach ergibt sich wegen $f'(\lambda) = -1/\lambda^2$ und $f''(\lambda) = 2/\lambda^3$ und das Integral in (5) zu

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^2 \exp(-2r/a_\mathrm{B}) = f''(2/a_\mathrm{B}) = \frac{2}{(2/a_\mathrm{B})^3} = \frac{a_\mathrm{B}^3}{4}.. \tag{10}$$

Für das Integral in (6) benötigen wir noch $f'''(\lambda) = -6/\lambda^4$:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^3 \exp(-2r/a_\mathrm{B}) = -f'''(2/a_\mathrm{B}) = \frac{6}{(2/a_\mathrm{B})^4} = \frac{6a_\mathrm{B}^4}{16} = \frac{3}{8} a_\mathrm{B}^4. \tag{11}$$

Aufgabe 2: Teilchen im Magnetfeld
Wir betrachten den Hamilton-Operator

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}[\vec{\mathbf{p}} - q\vec{A}(\vec{\mathbf{x}})]^2 = \frac{1}{2m}\left[\vec{\mathbf{p}}^2 - q\vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{A}(\vec{\mathbf{x}}) - q\vec{A}(\vec{\mathbf{x}}) \cdot \vec{\mathbf{p}} + q^2 \vec{A}^2(\vec{\mathbf{x}})\right]. \tag{12}$$

Wir wollen zeigen, dass dies die Bewegung eines Teilchens mit Masse m und Ladung q im Magnetfeld

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \tag{13}$$

entspricht. Dazu berechnen wir den Operator der Kraft auf das Teilchen:

(a) (5 Punkte) Die Komponenten der Geschwindigkeit des Teilchens sind gemäß der allgemeinen Formel für die Operatoren, die die Zeitableitung einer Observablen definieren (s. Skript!) durch

$$\mathbf{v}_j = \mathring{\mathbf{x}}_j = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\mathbf{x}_\mathrm{j}, \mathbf{H}\right] \tag{14}$$

gegeben. Zeigen Sie, dass

$$\mathbf{v}_j = \frac{1}{m}[\mathbf{p}_j - qA_j(\vec{\mathbf{x}})]. \tag{15}$$

Bemerkung: Beachten Sie, dass bei Anwesenheit von Magnetfeldern demnach der quantenmechanische Impuls nicht dem üblichen mechanischen Impuls entspricht sondern dem sog. „kanonischen Impuls“. Für Ortswellenfunktionen entspricht $\vec{\mathbf{p}} = -\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}$ also dem *kanonischen* Impuls und nicht dem gewöhnlichen „kinetischen“ Impuls $\vec{p}_\mathrm{kin} = m\vec{v}$ı der klassischen Mechanik.

Tip: Dabei sind die allgemeinen Kommutatorrelationen

$$\left[\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k\right] = \left[\mathbf{p}_j, \mathbf{p}_k\right] = 0, \quad \left[f(\vec{\mathbf{x}}), \mathbf{p}_j\right] = \mathrm{i}\hbar \partial_j f(\vec{\mathbf{x}}) \tag{16}$$

nützlich. Aus der letzten Gleichung (16) folgt natürlich auch die bekannte Heisenbergsche Kommutatorrelation $\left[\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}$ als Spezialfall.

Lösung: Wir rechnen die für (14) benötigten Kommutatoren von $\mathbf{x}_j$ mit den in $\mathbf{H}$ vorkommenden Operatorausdrücken aus. Dabei schreiben wir zur Abkürzung $\mathbf{A}_j = A_j(\vec{\mathbf{x}})$

$$\begin{aligned}
\left[\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_k\mathbf{p}_k\right] &= \left[\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_k\right]\mathbf{p}_k + \mathbf{p}_k\left[\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_k\right] = 2\mathrm{i}\hbar\delta_{jk}\mathbf{p}_k = 2\mathrm{i}\hbar\mathbf{p}_j \\
\left[\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_k\mathbf{A}_k\right] &= \left[\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_k\right]\mathbf{A}_k = \mathrm{i}\hbar\delta_{jk}\mathbf{A}_k = \mathrm{i}\hbar\mathbf{A}_j, \\
\left[\mathbf{x}_j, \mathbf{A}_k\mathbf{p}_k\right] &= \mathbf{A}_k\left[\mathbf{x}_j, \mathbf{p}_k\right] = \mathrm{i}\hbar\delta_{jk}\mathbf{A}_k = \mathrm{i}\hbar\mathbf{A}_j, \\
\left[\mathbf{x}_j, \mathbf{A}_k\mathbf{A}_k\right] &= 0.
\end{aligned} \tag{17}$$

Setzt man dies in (14) ein, erhält man tatsächlich (15).

Lösung der Zusatzaufgabe: Wir beweisen die letzte Gleichung von (16). Für eine beliebige Ortswellenfunktion gilt

$$\begin{aligned}
&f(\vec{\mathbf{x}})\mathbf{p}_j\psi(\vec{x}) = -\mathrm{i}\hbar f(\vec{x})\partial_j\psi(\vec{x}), \\
&\mathbf{p}_j f(\vec{\mathbf{x}})\psi(\vec{x}) = -\mathrm{i}\hbar\partial_j[f(\vec{x})\psi(\vec{x})] = -\mathrm{i}\hbar[\psi(\vec{x})\partial_j f(\vec{x}) + f(\vec{x})\partial_j\psi(\vec{x})].
\end{aligned} \tag{18}$$

Ziehen wir die untere von der oberen Gleichung ab, folgt

$$\left[f(\vec{\mathbf{x}}), \mathbf{p}_j\right]\psi(\vec{x}) = [\mathrm{i}\hbar\partial_j f(\vec{x})]\psi(\vec{x}) = [\mathrm{i}\hbar\partial_j f(\vec{\mathbf{x}})]\psi(\vec{x}). \tag{19}$$

Da dies für beliebige Ortswellenunktionen gilt ist damit die letzte Kommutatorbeziehung in (16) bewiesen.

(b) (5 Punkte) Zeigen Sie nun, dass die Operatoren der Kraftkomponenten

$$\mathbf{F}_j = m\mathring{\mathbf{v}}_j = \frac{m}{\mathrm{i}\hbar}\left[\mathbf{v}_j, \mathbf{H}\right] = \frac{q}{2}[\vec{\mathbf{v}} \times \vec{B}(\vec{\mathbf{x}}) - \vec{B}(\vec{\mathbf{x}}) \times \vec{\mathbf{v}}]_j \tag{20}$$

erfüllen.

Bemerkung: Das entspricht der Lorentz-Kraft auf ein Teilchen im Magnetfeld. Die Rechnung ergibt dabei die korrekte Verallgemeinerung von $\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B} = q(\vec{v} \times \vec{B} - \vec{B} \times \vec{v})/2$ auf die nicht kommutierenden Operatoren $\vec{\mathbf{v}}$ und $\vec{B}(\vec{\mathbf{x}})$, indem diese „symmetrisierte Form" des Kreuzprodukts selbstadjungierte Operatoren für die Operatoren der Kraftkomponenten liefert.

Lösung: Es gilt

$$\mathbf{F}_j = m\mathring{\mathbf{v}}_j = \frac{m}{\mathrm{i}\hbar}\left[\mathbf{p}_j - q\mathbf{A}_j, \mathbf{H}\right] \tag{21}$$

Wir rechnen wieder die einzelnen benötigten Kommutatoren mit Hilfe der Kommutatorregeln in (16) aus:

$$\begin{aligned}
\left[\mathbf{p}_j, \mathbf{p}_k\mathbf{A}_k\right] &= \mathbf{p}_k\left[\mathbf{p}_j, \mathbf{A}_k\right] = -\mathrm{i}\hbar\mathbf{p}_k\partial_j\mathbf{A}_k, \\
\left[\mathbf{p}_j, \mathbf{A}_k\mathbf{p}_k\right] &= \left[\mathbf{p}_j, \mathbf{A}_k\right]\mathbf{p}_k = -\mathrm{i}\hbar(\partial_j\mathbf{A}_k)\mathbf{p}_k, \\
\left[\mathbf{p}_j, \mathbf{A}_k\mathbf{A}_k\right] &= \left[\mathbf{p}_j, \mathbf{A}_k\right]\mathbf{A}_k + \mathbf{A}_k\left[\mathbf{p}_j, \mathbf{A}_k\right] = -2\mathrm{i}\hbar\mathbf{A}_k\partial_j\mathbf{A}_k, \\
\left[\mathbf{A}_j, \mathbf{p}_k\mathbf{p}_k\right] &= \left[\mathbf{A}_j, \mathbf{p}_k\right]\mathbf{p}_k + \mathbf{p}_k\left[\mathbf{A}_j, \mathbf{p}_k\right] = \mathrm{i}\hbar(\partial_k\mathbf{A}_j\mathbf{p}_k + \mathbf{p}_k\partial_k\mathbf{A}_j), \\
\left[\mathbf{A}_j, \mathbf{p}_k\mathbf{A}_k\right] &= \left[\mathbf{A}_j, \mathbf{p}_k\right]\mathbf{A}_k = \mathrm{i}\hbar(\partial_k\mathbf{A}_j)\mathbf{A}_k, \\
\left[\mathbf{A}_j, \mathbf{A}_k\mathbf{p}_k\right] &= \mathbf{A}_k\left[\mathbf{A}_j, \mathbf{p}_k\right] = \mathrm{i}\hbar(\partial_k\mathbf{A}_j)\mathbf{A}_k.
\end{aligned} \tag{22}$$

Setzen wir all diese Resultate in (21) ein, erhalten wir zunächst

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_j &= \frac{q}{2m}\Big[\mathbf{p}_k(\partial_j \mathbf{A}_k - \partial_k A_j) + (\partial_j \mathbf{A}_k - \partial_k A_j)\mathbf{p}_k\Big] - \frac{q^2}{m}(\partial_j \mathbf{A}_k - \partial_k A_j)\mathbf{A}_k \\ &= \frac{q}{2m}\Big[(\mathbf{p}_k - q\mathbf{A}_k)(\partial_j \mathbf{A}_k - \partial_k A_j) + (\partial_j \mathbf{A}_k - \partial_k A_j)(\mathbf{p}_k - q\mathbf{A}_k)\Big].\end{aligned} \tag{23}$$

Mit (15) können wir dafür

$$\mathbf{F}_j = \frac{q}{2}\Big[\mathbf{v}_k(\partial_j \mathbf{A}_k - \partial_k \mathbf{A}_j) + (\partial_j \mathbf{A}_k - \partial_k \mathbf{A}_j)\mathbf{v}_k\Big] \tag{24}$$

schreiben. Wegen $\vec{\mathbf{B}} = \vec{\nabla} \times \vec{\mathbf{A}}$ bzw. $\mathbf{B}_a = \epsilon_{abc}\partial_b \mathbf{A}_c$ folgt

$$\partial_j \mathbf{A}_k - \partial_k A_j = \epsilon_{jkl}\mathbf{B}_l \tag{25}$$

und damit

$$\mathbf{F}_j = \frac{q}{2}\epsilon_{jkl}(\mathbf{v}_k \mathbf{B}_l + \mathbf{B}_l \mathbf{v}_k) = \frac{q}{2}\epsilon_{jkl}(\mathbf{v}_k \mathbf{B}_l - \mathbf{B}_k \mathbf{v}_l) = \frac{q}{2}(\vec{\mathbf{v}} \times \vec{\mathbf{B}} - \vec{\mathbf{B}} \times \vec{\mathbf{v}})_j, \tag{26}$$

und das war zu zeigen.