# Übungsblatt 11 zur "Einführung in die Quantentheorie"

**WS 2012/13 Prof. H. Köppel**

Abgabetermin 21.01.2013 (11:00)

---

**Aufgabe 1 (Starrer Rotator).**
Die Energieeigenwerte eines starr rotierenden zweiatomigen Moleküls sind gegeben durch den Ausdruck der Vorlesung für die kinetische Energie bei Rotation um eine freie Achse

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1),$$

wobei die Masse $m$ des Teilchens durch die reduzierte Masse $\mu = m_1 m_2/(m_1+m_2)$ und der Abstand $r$ durch den Gleichgewichtsabstand $r_e$ des Moleküls zu ersetzen sind ($m_1$ und $m_2$ sind die Massen der beteiligten Atome).

**a)** Betrachten Sie das HCl-Molekül. Wie groß ist die Energiedifferenz zwischen dem Rotationsgrundzustand ($l = 0$) und dem ersten angeregten Rotationsniveau ($l = 1$)? Für HCl ist $r_e = 0.128$ nm. (2P)

**b)** Für das CO-Molekül ermittelt man zwischen dem ersten und zweiten angeregten Rotationsniveau eine Energiedifferenz von E = 0.00094 eV. Wie groß ist daher sein Gleichgewichtsabstand? Es kann mit ganzzahligen Atommassen (in amu) gerechnet werden.(2P)

**c)** In der Spektroskopie gibt man statt der Energie (oder Energiedifferenz) $E$ oft die reduzierte Energie $\bar{E}$ (reziproke Länge) an. Für diese gilt: $\bar{E} = E/(hc)$. Rechnen Sie die Energiedifferenzen aus den Teilaufgaben **a)** und **b)** in diese Einheiten um. (2P)

**d)** Die $Y_{lm}(\theta,\phi)$ mit $m = -l, -l+1, \ldots, +l$ bilden die Eigenlösungen des starren Rotators. Wie hoch ist demnach der Entartungsgrad der zugehörigen Eigenwerte $E_l$? (1P)

---

**Aufgabe 2 (Variationsansatz für das Wasserstoffatom).**
Für den Grundzustand des H-Atoms soll die Funktion

$$\Psi_{1s}(r,\theta,\phi) = N(\alpha) e^{-\alpha r}$$

bezüglich $\alpha$ optimiert werden, was dem Minimum des zugehörigen Erwartungswertes

$$E(\alpha) = \frac{\langle \Psi_{1s} | \hat{H} | \Psi_{1s} \rangle}{\langle \Psi_{1s} | \Psi_{1s} \rangle}, \quad \text{mit} \quad \frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = 0$$

entspricht. Ermitteln Sie den so definierten optimalen Wert für $\alpha$, bestimmen Sie den entsprechenden Energieerwartungswert und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem niedrigsten Energieeigenwert der Vorlesung. (4P)

---

*Bitte wenden!*

**Aufgabe 3 (Zweikörperproblem und reduzierte Masse).**

**a)** Rekapitulieren Sie die Rechenschritte des beigefügten Beiblatts zum Zweikörperproblem und bestätigen Sie damit den Ausdruck für die reduzierte Masse $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$ für die Relativbewegung des Zweikörperproblems. (2P)

**b)** Betrachten Sie die klassischen Newtonschen Bewegungsgleichungen für zwei Massenpunkte, die aufeinander mit der entgegengesetzt gleichen Kraft wirken:

$$m_1 \frac{d^2\vec{r}_1}{dt^2} = -\vec{F} \qquad m_2 \frac{d^2\vec{r}_2}{dt^2} = \vec{F}\,.$$

Leiten Sie durch Bilden geeigneter Linearkombinationen die untenstehenden Bewegungsgleichungen für die Schwerpunkts- und Relativkoordinate ab (für Notation vergleiche Beiblatt): (3P)

$$M \frac{d^2\vec{R}}{dt^2} = 0\,, \qquad \mu \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \vec{F}\,.$$

Interpretieren Sie das Ergebnis anschaulich. (1P)

---

**Aufgabe 4 (Reelle p-Funktionen).**

Zeigen Sie, dass die reellen $p_x$ und $p_y$ Funktionen keine Eigenfunktionen zu $\hat{L}_z$ sind. (2P)

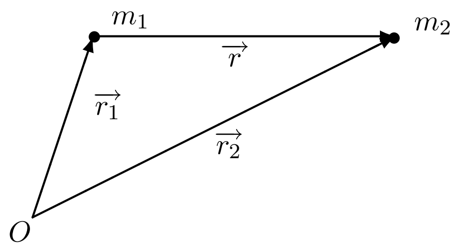
---

# Schwerpunkts- und Relativkoordinaten beim Zweikörperproblem

Betrachte 2 Massenpunkte (z.B. Atome eines zweiatomigen Moleküls), die miteinander wechselwirken.

Klassische kinetische Energie:

$$T = \frac{m_1}{2}\,\dot{\vec{r_1}}^2 + \frac{m_2}{2}\,\dot{\vec{r_2}}^2 \;.$$




Definiere Schwerpunkts- und Relativkoordinaten durch (vgl. Skizze):

$$\begin{cases} \vec{R} = & \frac{m_1\vec{r_1}+m_2\vec{r_2}}{m_1+m_2} \\ \vec{r} = & \vec{r_2}-\vec{r_1} \end{cases} .$$

$$\Rightarrow \quad \begin{aligned} \tfrac{m_1+m_2}{m_2}\vec{R} - \vec{r} &= \vec{r_1}\left(1+\frac{m_1}{m_2}\right) \\ \tfrac{m_1+m_2}{m_1}\vec{R} + \vec{r} &= \vec{r_2}\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right) \end{aligned}$$

Es folgt:

$$\begin{aligned} m_1\vec{r_1}^2 + m_2\vec{r_2}^2 &= m_1\left(\vec{R} - \frac{m_2}{M}\vec{r}\right)^2 + m_2\left(\vec{R} + \frac{m_1}{M}\vec{r}\right)^2 \\ &= (m_1+m_2)\vec{R}^2 + \frac{m_1m_2^2 + m_2m_1^2}{M^2}\vec{r}^2 \end{aligned}$$

Analoge Beziehungen gelten für die Zeitableitungen aller Ortsvektoren.

$$\Rightarrow \boxed{T = \frac{M}{2}\,\dot{\vec{R}}^2 + \frac{\mu}{2}\,\dot{\vec{r}}^2}\;,$$

wobei $M = m_1 + m_2$ und $\mu = \frac{m_1m_2}{M}$ die Gesamt- bzw. reduzierte Masse ist.

**$\Longrightarrow$ Separation von Schwerpunkts- und Relativbewegung!**