Institut für Theoretische Physik
Mateus Araújo, David Gross

1 Trennung von Variablen (10 P) Der Hamiltonoperator für ein Wasserstoffatom ist gegeben durch

$$H = \frac{1}{2m_p}P_p^2 + \frac{1}{2m_e}P_e^2 - \frac{k}{|R_p - R_e|},$$

wobei P_p, R_p die Impuls-und Ortsoperatoren von dem Proton, und P_e, R_e die Impuls- und Ortsoperatoren von dem Elektron sind. Um das Problem zu vereinfachen, können wir neue Orts- und Impulsoperatoren definieren, die diesen Hamiltonoperator in zwei unabhängige Hamiltonoperatoren trennen, einen für den Freiheitsgrad des Schwerpunkts und einen für den Freiheitsgrad der Relativbewegung.
Analog zu dem klassischen Problem sind die Schwerpunkts- und Relativbewegungs-Orts- und Impulsoperatoren durch

$$R_{SP} = \frac{1}{m_p + m_e}(m_p R_p + m_e R_e), \qquad R_r = R_p - R_e$$

$$P_{SP} = P_p + P_e \qquad P_r = \frac{1}{m_p + m_e}(m_e P_p - m_p P_e)$$

gegeben.

a) (0.5 P) Zeigen Sie, dass diese neuen Operatoren richtige Orts- und Impulsoperatoren sind, indem Sie die Vertauschungsrelationen für eine beliebige Komponente (z.B. x)

$$[R_{SP}^x, P_{SP}^x] = i\hbar \quad \text{und} \quad [R_r^x, P_r^x] = i\hbar$$

betrachten.

b) (1 P) Zeigen Sie, dass die neuen Freiheitsgrade unabhängig sind, indem Sie die Vertauschungsrelationen für eine beliebige Komponente (z.B. x)

$$[R_r^x, P_{SP}^x] = 0 \quad \text{und} \quad [R_{SP}^x, P_r^x] = 0$$

betrachten.

c) (1.5 P) Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator mit den neuen Operatoren durch

$$H = \frac{1}{2M}P_{SP}^2 + \frac{1}{2\mu}P_r^2 - \frac{k}{|R_r|}$$

gegeben ist, wobei

$$M = m_p + m_e \quad \text{und} \quad \mu = \frac{m_p m_e}{m_p + m_e}$$

die gesamte und die reduzierte Masse sind.

d) (1 P) Ein halbwegs realistisches Modell für die ganze Wellenfunktion von einem Wasserstoffatom ist ein Produkt zwischen einem gaußschen Wellenpaket für den Schwerpunkts-Freiheitsgrad mit einem sogenannten "1s Orbital" für den

Relativbewegungs-Freiheitsgrad. Wir werden dieses Oribtal in der nächsten Vorlesung bestimmen. Hier geben wir einen eindimensionalen Schnitt durch die dreidimensionale Lösung an. Er ist beschrieben durch:

$$\psi(x_{SP}, x_r) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{x_{SP}^2}{2\sigma^2}\right) \frac{1}{\sqrt{a_0}} \exp\left(-\frac{|x_r|}{a_0}\right),$$

und, wenn in Koordinaten für Proton und Elektron geschrieben,

$$\psi(x_p, x_e) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\mu_p x_p + \mu_e x_e)^2}{2\sigma^2}\right) \frac{1}{\sqrt{a_0}} \exp\left(-\frac{|x_p - x_e|}{a_0}\right),$$

wobei $\mu_e = m_e/M$ und $\mu_p = m_p/M$. Diese Wellenfunktion ist ein *verschränkter* Quantenzustand, das heißt, es ist kein Produkt zwischen einer Wellenfunktion $\varphi_p(x_p)$ für das Proton und einer Wellenfunktion $\varphi_p(x_p)$ für das Elektron. Zeigen Sie, dass für eine Produktwellenfunktion die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x_p, x_e)|^2$ auch faktorisieren würde:

$$|\psi(x_p, x_e)|^2 = \mathrm{Pr}_p(x_p)\mathrm{Pr}_e(x_e)$$

wobei

$$\mathrm{Pr}_p(x_p) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_e |\psi(x_p, x_e)|^2 \quad \text{und} \quad \mathrm{Pr}_e(x_e) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_p |\psi(x_p, x_e)|^2.$$

e) (3 P) Zeigen Sie, dass

$$\mathrm{Pr}_p(x_p) = \frac{1}{2a_0\mu_e} e^{\frac{\sigma^2}{a_0^2\mu_e^2}} \left(\exp\left(\frac{2x_p}{a_0\mu_e}\right)\mathrm{erfc}\left(\frac{\sigma}{a_0\mu_e} + \frac{x_p}{\sigma}\right) + \exp\left(-\frac{2x_p}{a_0\mu_e}\right)\mathrm{erfc}\left(\frac{\sigma}{a_0\mu_e} - \frac{x_p}{\sigma}\right)\right)$$

und

$$\mathrm{Pr}_e(x_e) = \frac{1}{2a_0\mu_p} e^{\frac{\sigma^2}{a_0^2\mu_p^2}} \left(\exp\left(\frac{2x_e}{a_0\mu_p}\right)\mathrm{erfc}\left(\frac{\sigma}{a_0\mu_p} + \frac{x_e}{\sigma}\right) + \exp\left(-\frac{2x_e}{a_0\mu_p}\right)\mathrm{erfc}\left(\frac{\sigma}{a_0\mu_p} - \frac{x_e}{\sigma}\right)\right),$$

wobei

$$\mathrm{erfc}(x) = 1 - \mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2}\, dt$$

die komplementäre Fehlerfunktion ist.

Hinweise: Nur eine von $\mathrm{Pr}_p(x_p)$ und $\mathrm{Pr}_e(x_e)$ muss gerechnet werden. Eine nützliche Eigenschaft von der Betragsfunktion ist, dass $|x_p - x_e| = x_p - x_e$ für $x_p \geq x_e$ und $|x_p - x_e| = -x_p + x_e$ für $x_p \leq x_e$.

f) (1 P) Zeigen Sie, dass

$$|\psi(x_p, x_e)|^2 \neq \mathrm{Pr}_p(x_p)\mathrm{Pr}_e(x_e)$$

und folgern Sie daraus, dass $\psi(x_p, x_e)$ verschränkt ist.

g) (1 P) Plotten Sie mit einem Computer $\mathrm{Pr}_p(x_p)$ zusammen mit

$$\mathrm{Pr}_{SP}(x_{SP}) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_r |\psi(x_{SP}, x_r)|^2 = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{x_{SP}^2}{\sigma^2}\right)$$

um zu zeigen, dass x_{SP} eigentlich ein guter Ersatz für x_p ist.

h) (1 P) Plotten Sie mit einem Computer $\mathrm{Pr}_e(x_e)$ zusammen mit

$$\mathrm{Pr}_r(x_r) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_{SP} |\psi(x_{SP}, x_r)|^2 = \frac{1}{a_0} \exp\left(-\frac{2|x_r|}{a_0}\right),$$

um zu zeigen, dass x_r keine guter Ersatz für x_e ist.