Vorbemerkung

Dies ist ein abgegebener Übungszettel aus dem Modul physik421.

Dieser Übungszettel wurde nicht korrigiert. Es handelt sich lediglich um meine Abgabe und keine Musterlösung.

Alle Übungszettel zu diesem Modul können auf http://martin-ueding.de/de/university/bsc_physics/physik421/ gefunden werden.

[disclaimer]

physik421 – Übung 8

Gruppe 4 – Franz Niecknig

Martin Ueding [*]

2014-07-07

H 12. Nachtrag zum Wasserstoffatom

H 12a. Ansatz

$$
\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1\right)\rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) = 0 \\
&\frac{\partial}{\partial\rho}\left(l(l+1)\rho^l\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) - \rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) + \rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega'(\rho)\right) - l(l+1)\rho^{l-1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) \\
&\qquad + \rho_0\rho^l\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) - \rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) = 0
\end{aligned}
$$

Führe an dieser Stelle Farben ein, um das Termmemory zu erleichtern.

$$
\begin{aligned}
&l(l+1)\rho^{l-1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) - (l+1)\rho^l\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) + (l+1)\rho^l\mathrm{e}^{-\rho}\omega'(\rho) + (l+1)\rho^l\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) \\
&\quad + \rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) - \rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega'(\rho) + (l+1)\rho^l\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) - \rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega'(\rho) \\
&\quad + \rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega''(\rho) - l(l+1)\rho^{l-1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) + \rho_0\rho^l\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) - \rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) = 0
\end{aligned}
$$

Nach Umsortieren bleiben:

$$
\begin{aligned}
&-2(l+1)\rho^l\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) + 2(l+1)\rho^l\mathrm{e}^{-\rho}\omega'(\rho) - 2\rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega'(\rho) + \rho^{l+1}\mathrm{e}^{-\rho}\omega''(\rho) \\
&\qquad + \rho_0\rho^l\mathrm{e}^{-\rho}\omega(\rho) = 0
\end{aligned}
$$

Entferne die $\mathrm{e}^{-\rho}$ komplett, und im nächsten Schritt teile ich durch ρ^l.

$$
\begin{aligned}
&-2(l+1)\rho^l\omega(\rho) + 2(l+1)\rho^l\omega'(\rho) - 2\rho^{l+1}\omega'(\rho) + \rho^{l+1}\omega''(\rho) + \rho_0\rho^l\omega(\rho) = 0 \\
&-2(l+1)\omega(\rho) + 2(l+1)\omega'(\rho) - 2\rho\omega'(\rho) + \rho\omega''(\rho) + \rho_0\omega(\rho) = 0
\end{aligned}
$$

[*] mu@uni-bonn.de

Umstellen und Gruppieren gibt die gewünschte Differentialgleichung.

$$\rho\omega''(\rho) + 2(l+1-\rho)\omega'(\rho) + \big(\rho_0 - 2(l+1)\big)\,\omega(\rho) = 0$$

H 12b. Potenzreihenansatz

Setze an mit:

$$\omega(\rho) = \sum_k a_k \rho^k$$

Setze dies in die Differentialgleichung ein:

$$\sum_k \Big(k(k-1)a_k\rho^{k-1} + 2(l+1-\rho)ka_k\rho^{k-1} + \big(\rho_0 - 2(l+1)\big)\,a_k\rho^k\Big) = 0$$

Dies ist auf jeden Fall erfüllt, wenn jeder Summand null ist. Also:

$$\begin{aligned}(k+1)ka_{k+1}\rho^k + 2(l+1)(k+1)a_{k+1}\rho^k - 2(k+1)a_{k+1}\rho^{k+1} + \big(\rho_0 - 2(l+1)\big)\,a_k\rho^k &= 0\\ (k+1)ka_{k+1} + 2(l+1)(k+1)a_{k+1} - 2ka_k + \big(\rho_0 - 2(l+1)\big)\,a_k &= 0\\ \big((k+1)k + 2(l+1)(k+1)\big)\,a_{k+1} + \big(\rho_0 - 2(l+1) - 2k\big)\,a_k &= 0\end{aligned}$$

Erhalte die gesuchte Rekursionsbeziehung:

$$a_{k+1} = \frac{2(l+1) + 2k - \rho_0}{(k+1)(k+2l+2)}a_k$$

H 13. Erwartungswerte zum Wasserstoffatom

H 13a. Reskalierung

Beginne mit:

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{\rho_0}{\rho} - 1\right)u_l(\rho) = 0$$

Substituiere $\bar{\rho} := \rho n$ mit $\rho = \bar{\rho}/n$. Nach der Kettenregel:

$$\frac{\mathrm{d}\bar{\rho}}{\mathrm{d}\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\bar{\rho}} = n\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\bar{\rho}} \rightsquigarrow n^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\bar{\rho}^2}$$

Damit folgt:

$$\begin{aligned}\left(n^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\bar{\rho}^2} - n^2\frac{l(l+1)}{\bar{\rho}^2} + n\frac{\rho_0}{\bar{\rho}} - 1\right)u_l(\rho) = 0 \\ \left(\frac{l(l+1)}{\bar{\rho}^2} - \frac{\rho_0}{n\bar{\rho}} + \frac{1}{n^2}\right)u_l(\rho) = u_l''(\rho)\end{aligned}$$

Das kommt allerdings nicht hin, da $\rho_0/n \neq 2$ ist.

H 13b. Integration der Differentialgleichung

Rechte Seite

$$\begin{aligned}\mathrm{RS} &= \left(\frac{1}{n^2} - \frac{2}{\bar{\rho}} + \frac{l(l+1)}{\bar{\rho}^2}\right)u_l^2(\bar{\rho})\,\bar{\rho}^q \\ &\rightsquigarrow \int_0^\infty \mathrm{d}\bar{\rho}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{2}{\bar{\rho}} + \frac{l(l+1)}{\bar{\rho}^2}\right)u_l^2(\bar{\rho})\,\bar{\rho}^q\end{aligned}$$

Mit der Definition

$$\langle q\rangle := \int_0^\infty \mathrm{d}\bar{\rho}\, u_l^2(\bar{\rho})\,\bar{\rho}^q$$

folgt:

$$= \frac{1}{n^2}\langle q\rangle - 2\langle q-1\rangle + l(l+1)\langle q-2\rangle$$

Linke Seite

$$\begin{aligned}\mathrm{LS} &= u_l''(\bar{\rho})u_l(\bar{\rho})\,\bar{\rho}^q \\ &\rightsquigarrow \int_0^\infty \mathrm{d}\bar{\rho}\, u_l''(\bar{\rho})u_l(\bar{\rho})\,\bar{\rho}^q\end{aligned}$$

Hier fehlen noch Inhalte.

Einsetzen in Differentialgleichung

Beginne mit

$$\frac{\langle q\rangle}{n}-2\langle q-1\rangle+l(l+1)\langle q-2\rangle=\frac{1}{2}q(q-1)\langle q-2\rangle+\int_0^\infty \mathrm{d}\bar\rho\,\frac{\bar\rho^{q+1}}{q+1}2u_l''(\bar\rho)u_l'(\bar\rho)$$

Setze die Differentialgleichung ein.

$$\frac{\langle q\rangle}{n}-2\langle q-1\rangle+l(l+1)\langle q-2\rangle=\frac{1}{2}q(q-1)\langle q-2\rangle+\int_0^\infty \mathrm{d}\bar\rho\,\frac{\bar\rho^{q+1}}{q+1}2\left(\frac{1}{n^2}-\frac{2}{\bar\rho}+\frac{l(l+1)}{\bar\rho^2}\right)u_l(\bar\rho)u_l'(\bar\rho)$$

Betrachte nun nur das Integral und zerlege es in Summanden:

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty \mathrm{d}\bar\rho\,\frac{\bar\rho^{q+1}}{q+1}2\left(\frac{1}{n^2}-\frac{2}{\bar\rho}+\frac{l(l+1)}{\bar\rho^2}\right)u_l(\bar\rho)u_l'(\bar\rho)\\&=\int_0^\infty \mathrm{d}\bar\rho\,\frac{\bar\rho^{q+1}}{q+1}2\frac{1}{n^2}u_l(\bar\rho)u_l'(\bar\rho)-\int_0^\infty \mathrm{d}\bar\rho\,\frac{\bar\rho^{q+1}}{q+1}2\frac{2}{\bar\rho}u_l(\bar\rho)u_l'(\bar\rho)+\int_0^\infty \mathrm{d}\bar\rho\,\frac{\bar\rho^{q+1}}{q+1}2\frac{l(l+1)}{\bar\rho^2}u_l(\bar\rho)u_l'(\bar\rho)\end{aligned}$$

Wende Trick an:

$$2uu'=\left(u^2\right)'$$

Das erste Integral, ohne Randterme:

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \mathrm{d}\bar\rho\,\frac{\bar\rho^{q+1}}{q+1}\frac{1}{n^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\bar\rho}u_l(\bar\rho)&=-\int_0^\infty \mathrm{d}\bar\rho\,\frac{\bar\rho^{q+1}}{n^2}u_l(\bar\rho)\\&=-\frac{1}{n^2}\langle q\rangle\end{aligned}$$

Zweites Integral, gleiche Vorgehensweise:

$$\frac{q}{q+1}\langle q-1\rangle$$

Drittes Integral:

$$-l(l+1)\frac{q-1}{q+1}\langle q-2\rangle$$

Setze dies mit den restlichen Termen wieder zusammen:

$$\begin{aligned}&\frac{\langle q\rangle}{n}-2\langle q-1\rangle+l(l+1)\langle q-2\rangle\\&=\frac{1}{2}q(q-1)\langle q-2\rangle-\frac{1}{n^2}\langle q\rangle+\frac{q}{q+1}\langle q-1\rangle-l(l+1)\frac{q-1}{q+1}\langle q-2\rangle\end{aligned}$$

Multipliziere mit $2n^2(q+1)$, um alle Nenner zu entfernen:

$$\begin{aligned}&2(q+1)\langle q\rangle-4n^2(q+1)\langle q-1\rangle+2l(l+1)n^2(q+1)\langle q-2\rangle\\&=qn^2(q+1)(q-1)\langle q-2\rangle-2(q+1)\langle q\rangle+2qn^2\langle q-1\rangle-2l(l+1)n^2(q+1)(q-1)\langle q-2\rangle\end{aligned}$$

Die Terme fasse ich nach den $\langle q-i\rangle$ zusammen und erhalte:

$$\begin{aligned}&\langle q\rangle\big(2(q+1)+2(q+1)\big)\\&+\langle q-1\rangle\big(-4n^2(q+1)-2n^2q\big)\\&+\langle q-2\rangle\big(2l(l+1)n^2(q+1)-q(q-1)n^2(q+1)+2n^2l(l+1)(q-1)\big)=0\end{aligned}$$

Mit folgender Nebenrechnung für den $\langle q-2\rangle$ Term

$$\begin{aligned}2l(l+1)n^2(q+1)-q(q-1)n^2(q+1)+2n^2l(l+1)(q-1)&=4n^2ql(l+1)-q(q+1)(q-1)n^2\\&=n^2q\left(4l^2+4l-\left(q^2-1\right)\right)\\&=n^2q\left((2l+1)^2-1-q^2+1\right)\\&=n^2q\left((2l+1)^2-q^2\right)\end{aligned}$$

folgt, zusammen mit anderen Umformungen:

$$\begin{aligned}&\langle q\rangle\big(4(q+1)\big)\\&+\langle q-1\rangle\big(-n^2(2q+1)\big)\\&+\langle q-2\rangle n^2q\left((2l+1)^2-q^2\right)=0\end{aligned}$$

Bis auf einen Faktor 4, der in der Aufgabenstellung mehr ist, stimmt dies mit der gesuchten Gleichung überein.

H 13c. Matrixelemente

Hier fehlen noch Inhalte.