Theoretische Physik I/II

WS 2016/17 **18.11.2016**
Übungsblatt III **Abgabedatum 25.11.2016**

Dr. Ferdi Schank http://qsolid.uni-saarland.de/?Lehre

Aufgabe 1 *Virialsatz*

Gegeben sei eine Lagrangefunktion mit f Freiheitsgraden und generalisierten Koordinaten $\mathbf{q_i}$ der Form

$$\mathcal{L} = \sum_{i,j=1}^{f} c_{ij}(\mathbf{q})\dot{q}_i\dot{q}_j - V(\mathbf{q}) \tag{1}$$

mit $c_{ij}(\mathbf{q}) = c_{ji}(\mathbf{q}) < \infty$. Weiterhin definieren wir

$$G \equiv \sum_{i=1}^{f} q_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \tag{2}$$

a) Bestimmen Sie $\dot{G} \equiv dG/dt$ und geben Sie die kinetische Energie $T = T(\dot{G}, q_i, \partial\mathcal{L}/\partial q_i)$ an. *(1.5 Punkte)*

Wir definieren das zeitliche Mittel einer Funktion $f(q, \dot{q}, t)$ als

$$\bar{f} \equiv \lim_{\tau\to\infty} \frac{1}{2\tau} \int_{-\tau}^{+\tau} f(q, \dot{q}, t)dt. \tag{3}$$

b) Nutzen Sie das Ergebnis aus a) um $\bar{T}$ zu berechnen. Nehmen Sie dabei an, dass die generalisierten Lage und Geschwindigkeitskoordinaten nicht unendlich werden können. Das Ergebnis Ihrer Berechnungen stellt den Virialsatz da, welcher sowohl in klassischer Physik als auch in der Quantenphysik Gültigkeit besitzt. *(1.5 Punkte)*

Aufgabe 2 *Das molekular-elektronische Virialtheorem*

Der Virialsatz ist sowohl in der klassischen wie auch in der Quantenphysik wiederzufinden. Jetzt werden Sie wohl in den meisten Fällen noch keine Theorievorlesung über Quantenmechanik besucht haben, nichtsdestotrotz können Sie bereits die folgende Aufgabe lösen, solange Sie keine Angst vor einer neuen Schreibweise besitzen. Wir definieren

$$\langle\Psi|H|\Psi\rangle = \int \Psi(\mathbf{r})^* H \Psi(\mathbf{r}) d^3r. \tag{4}$$

$\Psi(\mathbf{r})$ ist hierbei z.B eine Funktion die das Elektrons innerhalb eines Atoms/Moleküls beschreibt. Bei H handelt es sich nicht um eine Funktion, sondern um einen sogenannten Operator, dem *Hamiltonoperator*, welcher auf eine Funktion wirkt (in Form einer Ableitung o. ähnliches)

$$H(\mathbf{R}) = T + V(\mathbf{R}), \tag{5}$$

mit

$$T = -\frac{1}{2}\sum_i \nabla_i^2 \tag{6}$$

$$V(\mathbf{R}) = \sum_{i>j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{iI} \frac{Z_I}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I|} + \sum_{I>J} \frac{Z_I Z_J}{|\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_J|}. \tag{7}$$

Großgeschriebene Indizes I, J beziehen sich auf Nukleonen, kleingeschriebene i, j auf Elektronen, Z_I ist eine Kernladungszahl-abhängige Konstante, ∇_i^2 kennen Sie aus den mathematischen Methoden der Physik. H hängt von den generalisierten Koordinaten der Nukleonen $\mathbf{R}$ ab. Angenommen, die Funktion Ψ besäße folgende Eigenschaften

$$\Psi(\mathbf{r}_i) \;\to\; \Psi_\alpha(\mathbf{r}_i) = \alpha^{3N/2}\Psi(\alpha\mathbf{r}_i), \tag{8}$$

wobei N die Anzahl der Elektronen im System angibt und α so gewählt ist, dass für $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ auch $\langle\Psi_\alpha|\Psi_\alpha\rangle = 1$ gilt.

a) Zeigen Sie, dass

$$\langle\Psi_\alpha|T|\Psi_\alpha\rangle = \alpha^2 \langle\Psi|T|\Psi\rangle \tag{9}$$

$$\langle\Psi_\alpha|H(\mathbf{R})|\Psi_\alpha\rangle = \alpha \langle\Psi|H(\alpha\mathbf{R})|\Psi\rangle \tag{10}$$

gilt. *(4.0 Punkte)*

b) Leiten Sie aus der Bedingung

$$\frac{\partial}{\partial\alpha} \langle\Psi_\alpha|H(\mathbf{R})|\Psi_\alpha\rangle\big|_{\alpha=1} = 0 \tag{11}$$

das Virialtheorem

$$2\langle\Psi|T|\Psi\rangle + \langle\Psi|V(\mathbf{R})|\Psi\rangle = -\langle\Psi|\, \tfrac{d}{d\alpha}V(\alpha\mathbf{R})\big|_{\alpha=1}|\Psi\rangle \tag{12}$$

für ein nicht-relativistisches, feldfreies molekular-elektronisches System her. *(3.0 Punkte)*

Aufgabe 3 *Reduktion vom Zwei- zum Einkörperproblem*

Betrachten Sie zwei Körper welche nur durch die Gravitationskraft

$$\mathbf{F}_{1,2} = -G\frac{m_1 m_2}{r^2}\hat{\mathbf{r}} \tag{13}$$

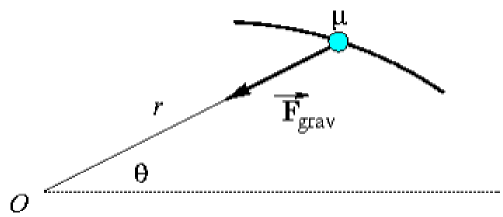
miteinander wechselwirken ($\mathbf{F}_{1,2}$ beschreibt hier die Kraft, die auf Körper 1 durch Körper 2 ausgeübt wird). Dabei ist $\mathbf{r}_1$ ($\mathbf{r}_1$) der Ortsvektor vom Koordinatenursprung zum Körper 1 (Körper 2), $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ und normiertem Richtungsvektor $\hat{\mathbf{r}}$, sodass $\mathbf{r} = r\hat{\mathbf{r}}$, mit $r = |\mathbf{r}|$.

a) Die reduzierte Masse μ ist gegeben durch $\mu = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$. Nutzen Sie Newton's Axiome, um zu zeigen, dass

$$\mathbf{F}_{1,2} = \mu \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} \tag{14}$$

gilt. *(1 Punkt)*

Das äquivalente Einkörperproblem besitzt zwei Konstanten der Bewegung, die Energie E und den Drehimpuls L bezüglich des Koordinatenursprungs. Die reduzierte Masse bewege sich in der xz-Ebene, wobei r den Abstand zwischen μ und dem Koordinatenursprung und θ den von $\hat{\mathbf{r}}$ und x-Achse eingeschlossenen Winkel beschreiben (vgl. Abbildung). Auf sie wirke eine radial anziehende Kraft $\mathbf{F}_{\text{grav}}$ in Richtung Koordinatenursprung.



Der Geschwindigkeitsvektor kann in zwei Anteile $\mathbf{v} = v_{\text{rad}}\hat{\mathbf{r}} + v_{\tan}\hat{\boldsymbol{\theta}}$ aufgeteilt werden. Die Gesamtenergie ist dann gegeben durch

$$E = \frac{1}{2}\mu \left[\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + \left(r\frac{d\theta}{dt}\right)^2 \right] - \frac{Gm_1m_2}{r}. \tag{15}$$

b) Wie lautet der Drehimpuls L bzgl. des Koordinatenursprungs? *(1 Punkt)*

c) Zeigen Sie, dass

$$\frac{dr}{dt} = \sqrt{\frac{2}{\mu}} \left(E - \frac{1}{2}\frac{L^2}{\mu r^2} + \frac{Gm_1m_2}{r} \right)^{\frac{1}{2}}. \tag{16}$$

(1.5 Punkte)

d) Stellen Sie mit $d\theta/dt = L/(\mu r^2)$ und Gl.(16) eine separabele Differentialgleichung $d\theta/dr$ auf. *(0.5 Punkte)*

e) Zeigen Sie mit Hilfe der Substitution $u = 1/r$ und der Größen $r_0 = L^2/(\mu G m_1 m_2)$ und $\varepsilon = \sqrt{2\mu E r_0^2/L^2 + 1}$, dass

$$d\theta = -\frac{r_0 du}{\sqrt{\varepsilon^2 - (r_0 u - 1)^2}}. \tag{17}$$

(3.0 Punkte)

f) Lösen Sie Gl. (17) mit Hilfe der Substitution $r_0 u - 1 = \varepsilon \cos\alpha$, wobei $\theta = \alpha - \pi$. *(1 Punkt)*

Aufgabe 4 *Allgemeine Bewegung im Zentralfeld*
Betrachtet wird die Bewegung eines Körpers im Zentralfeld $V(r)$, welche durch die Bewegungsgleichung

$$m\ddot{\mathbf{r}} = F(r)\frac{\mathbf{r}}{r} = -\nabla V(r) \tag{18}$$

mit $V(r) = -\int_{r_0}^{r} F(r')dr'$ beschrieben wird. Der Drehimpuls um den Koordinatenursprung zeige in z-Richtung, $\mathbf{L} = L\hat{\mathbf{z}}$.

a) Führen Sie Polarkoordinaten mit orthogonalen Einheitsvektoren $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$ und $\hat{\boldsymbol{\theta}} = \hat{\mathbf{z}} \times \hat{\mathbf{r}}$ ein. Leiten Sie aus $\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{x}} = \cos\theta$, $\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{y}} = \sin\theta$, $\hat{\boldsymbol{\theta}}\hat{\mathbf{x}} = -\sin\theta$ und $\hat{\boldsymbol{\theta}}\hat{\mathbf{y}} = \cos\theta$ einen Ausdruck für die Geschwindigkeit $\mathbf{v}$ aufgeteilt in Tangential- und Radialteil her. Bestimmen Sie damit die Azimutalgleichung $\dot{\theta}(r)$. *(2.0 Punkte)*

b) Nutzen Sie den Energieerhaltungssatz um die Radialgleichung $\dot{r}(r)$ aufzustellen. Bestimmen Sie damit die implizite Radialgleichung $t(r)$. Führen Sie dabei das effektive Potential $U(r) = V(r) + L^2/(2mr^2)$ ein. *(2.0 Punkte)*

c) Geben Sie die Bahngleichung $\theta(r)$ mit Hilfe der Azimutalgleichung aus Teil a) und unter Ausnutzung der Energieerhaltung an. *(2.0 Punkte)*