Hochschule RheinMain
Prof. Dr. D. Lehmann WS 2022/23

Lösungen 8. Übungsblatt Quantenmechanik

Aufgabe 1: In dem `week8.pdf` hatten wir bereits die folgenden Formeln notiert:

$$\begin{aligned}\dot{\vec e}_r &= \dot\varphi\,\sin\theta\,\vec e_\varphi \;+\; \dot\theta\,\vec e_\theta \\ \dot{\vec e}_\varphi &= -\dot\varphi\,\sin\theta\,\vec e_r \;-\; \dot\varphi\,\cos\theta\,\vec e_\theta \\ \dot{\vec e}_\theta &= \dot\varphi\,\cos\theta\,\vec e_\varphi \;-\; \dot\theta\,\vec e_r\end{aligned}$$

Hier brauchen wir nur die erste Gleichung davon und bekommen

$$\begin{aligned}\vec x &= r\,\vec e_r \\ \dot{\vec x} &= \dot r\,\vec e_r \;+\; r\,\dot{\vec e}_r \\ &= \tfrac{\dot r}{r}\,r\vec e_r \;+\; r\left\{\dot\varphi\,\sin\theta\,\vec e_\varphi \;+\; \dot\theta\,\vec e_\theta\right\} \\ &= \tfrac{\dot r}{r}\,\vec x \;+\; r\dot\varphi\,\sin\theta\,\vec e_\varphi \;+\; r\dot\theta\,\vec e_\theta\end{aligned}$$

Das können wir in das $\vec L$ einsetzen,

$$\begin{aligned}\vec L &= \vec x\times\vec p \;=\; m\,\vec x\times\dot{\vec x} \\ &= m\,\vec x\times\left\{\tfrac{\dot r}{r}\,\vec x \;+\; r\dot\varphi\,\sin\theta\,\vec e_\varphi \;+\; r\dot\theta\,\vec e_\theta\right\} \\ &= m\,\vec x\times\left\{r\dot\varphi\,\sin\theta\,\vec e_\varphi \;+\; r\dot\theta\,\vec e_\theta\right\} \\ &= mr\,\vec e_r\times\left\{r\dot\varphi\,\sin\theta\,\vec e_\varphi \;+\; r\dot\theta\,\vec e_\theta\right\} \\ &= mr^2\dot\varphi\,\sin\theta\;\vec e_r\times\vec e_\varphi \;+\; mr^2\dot\theta\;\vec e_r\times\vec e_\theta\end{aligned}$$

Wir berechnen die Vekorprodukte,

$$\vec e_r\times\vec e_\varphi \;=\; \det\begin{pmatrix}\vec e_1 & \cos\varphi\,\sin\theta & -\sin\varphi \\ \vec e_2 & \sin\varphi\,\sin\theta & \cos\varphi \\ \vec e_3 & \cos\theta & 0\end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix}-\cos\varphi\,\cos\theta \\ -\sin\varphi\,\cos\theta \\ +\sin\theta\end{pmatrix} \;=\; -\vec e_\theta$$

und

$$\vec e_r\times\vec e_\theta \;=\; \det\begin{pmatrix}\vec e_1 & \cos\varphi\,\sin\theta & \cos\varphi\,\cos\theta \\ \vec e_2 & \sin\varphi\,\sin\theta & \sin\varphi\,\cos\theta \\ \vec e_3 & \cos\theta & -\sin\theta\end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix}-\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0\end{pmatrix} \;=\; +\vec e_\varphi$$

Also,

$$\begin{aligned}\vec L &= mr^2\dot\varphi\,\sin\theta\;\vec e_r\times\vec e_\varphi \;+\; mr^2\dot\theta\;\vec e_r\times\vec e_\theta \\ &= \;-\,mr^2\dot\varphi\,\sin\theta\;\vec e_\theta \;+\; mr^2\dot\theta\;\vec e_\varphi\end{aligned}$$

und damit, da die $(\vec e_r,\vec e_\varphi,\vec e_\theta)$ eine Orthonormalbasis bilden,

$$\vec L^{\,2} \;=\; (m\,r^2)^2\left\{\,\dot\theta^2 \;+\; \dot\varphi^2\,\sin^2\theta\,\right\}\;.$$

Aufgabe 2: a) Bekommen wir mit partieller Integration:

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^n} (\Delta f)(x)\,\varphi(x)\;d^n x \;\;&=\;\; \int_{\mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}\,\varphi(x)\;d^n x \\
&= \sum_{i=1}^n \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}\,\varphi(x)\;dx_i\;d^{n-1}x \\
&= \sum_{i=1}^n \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \frac{\partial f}{\partial x_i}\,\varphi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty}\;d^{n-1}x \;-\; \sum_{i=1}^n \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial f}{\partial x_i}\,\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}\;dx_i\;d^{n-1}x \\
&= 0 \;-\; \int_{\mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}\,\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}\;d^n x \\
&= -\int_{\mathbb{R}^n} \langle\, \nabla_x f\,,\, \nabla_x \varphi\,\rangle(x)\;d^n x
\end{aligned}$$

b) Mit der Kettenregel bekommen wir

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} \;=\; \sum_{j=1}^n \frac{\partial g}{\partial u_j}\,\frac{\partial u_j}{\partial x_i}$$

oder in Matrix-Vektor Notation, mit den Gradienten als Spaltenvektoren,

$$\nabla_x f \;=\; \Big(\frac{\partial u}{\partial x}\Big)^T \nabla_u g$$

Mit der Transformationsformel für n-dimensionale Integrale,

$$d^n x \;=\; \big|\det \tfrac{\partial x}{\partial u}\big|\;d^n u$$

folgt dann die Aussage von Teil (b).

c) Es ist mit Teil (b)

$$\begin{aligned}
\langle\, \nabla_x f\,,\nabla_x \varphi\,\rangle \;\;&=\;\; \Big\langle\, \big(\tfrac{\partial u}{\partial x}\big)^T \nabla_u g\;,\; \big(\tfrac{\partial u}{\partial x}\big)^T \nabla_u \tilde{\varphi}\,\Big\rangle \\
&=\;\; \Big\langle\, \tfrac{\partial u}{\partial x}\big(\tfrac{\partial u}{\partial x}\big)^T \nabla_u g\;,\; \nabla_u \tilde{\varphi}\,\Big\rangle
\end{aligned}$$

Im week8.pdf hatten wir bereits gezeigt, in Gleichung (32),

$$\frac{\partial u}{\partial x} \;=\; \big(\frac{\partial x}{\partial u}\big)^{-1}$$

Also,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial x}\big(\frac{\partial u}{\partial x}\big)^T \;\;&=\;\; \big(\frac{\partial x}{\partial u}\big)^{-1}\Big[\big(\frac{\partial x}{\partial u}\big)^{-1}\Big]^T \\
&=\;\; \big(\frac{\partial x}{\partial u}\big)^{-1}\Big[\big(\frac{\partial x}{\partial u}\big)^{T}\Big]^{-1} \\
&=\;\; \Big[\big(\frac{\partial x}{\partial u}\big)^{T}\frac{\partial x}{\partial u}\Big]^{-1} \\
&=\;\; M^{-1}
\end{aligned}$$

Weiterhin können wir schreiben, wegen $\det A = \det(A^T)$

$$
\begin{aligned}
\left|\det \frac{\partial x}{\partial u}\right| &= \sqrt{\left|\det \frac{\partial x}{\partial u}\right|^2} = \sqrt{\left|\det\left(\frac{\partial x}{\partial u}\right)^T \det \frac{\partial x}{\partial u}\right|} = \sqrt{\left|\det\left[\left(\frac{\partial x}{\partial u}\right)^T \frac{\partial x}{\partial u}\right]\right|} \\
&= \sqrt{\det M}
\end{aligned}
$$

Also, mit (b),

$$
\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^n} (\Delta f)(x)\, \varphi(x)\; d^n x &= -\int_\Omega \Big\langle\ \tfrac{\partial u}{\partial x} \big(\tfrac{\partial u}{\partial x}\big)^T \nabla_u g\ ,\ \nabla_u \tilde\varphi\ \Big\rangle(u)\ \left|\det \tfrac{\partial x}{\partial u}\right|\ d^n u \\
&= -\int_\Omega \Big\langle\ M^{-1}\, \nabla_u g\ ,\ \nabla_u \tilde\varphi\ \Big\rangle(u)\ \sqrt{\det M}\ d^n u
\end{aligned}
$$

d) Wir nehmen das Resultat aus (c) und bringen das ∇_u mit einer weiteren partiellen Integration von dem $\tilde\varphi$ wieder auf das g:

$$
\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^n} (\Delta f)(x)\, \varphi(x)\; d^n x &= -\int_\Omega \Big\langle\ M^{-1}\, \nabla_u g\ ,\ \nabla_u \tilde\varphi\ \Big\rangle(u)\ \sqrt{\det M}\ d^n u \\
&= -\sum_{j,k=1}^n \int_\Omega \sqrt{\det M}\ M^{-1}_{j,k}\ \frac{\partial g}{\partial u_k}\ \frac{\partial \tilde\varphi}{\partial u_j}\ d^n u \\
&= +\sum_{j,k=1}^n \int_\Omega \frac{\partial}{\partial u_j} \Big\{ \sqrt{\det M}\ M^{-1}_{j,k}\ \frac{\partial g}{\partial u_k} \Big\}(u)\ \tilde\varphi(u)\ d^n u \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{\sqrt{\det M}} \sum_{j,k=1}^n \frac{\partial}{\partial u_j} \Big\{ \sqrt{\det M}\ M^{-1}_{j,k}\ \frac{\partial g}{\partial u_k} \Big\}(u(x))\ \varphi(x)\ d^n x
\end{aligned}
$$

und da M symmetrisch ist, $M_{k,\ell} = M_{\ell,k}$, ist auch M^{-1} symmetrisch und Formel (5) folgt.