

1. H_2^+ Molekül

Lösen Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung des einfach ionisierten Wasserstoff-Moleküls in adiabatischer Näherung (die Kerne sind wesentlich schwerer als die Elektronen sodass ihre Bewegung vernachlässigt werden kann). Lösen Sie also

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

wobei \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 die (konstanten) Positionen der Kerne sind und \mathbf{r} die Position des Elektrons. Der Abstand des Elektrons zum ersten Kern ist dann $r_a = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}|$ und der Abstand zum zweiten $r_b = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}|$, der Abstand zw. den Kernen ist $R = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$. Führen Sie elliptische Koordinaten

$$\lambda = \frac{r_a + r_b}{R}$$
$$\mu = \frac{r_a - r_b}{R}$$

und ϕ als Rotation um die die Kerne verbindende z -Achse ein (sodass die Kerne auf $(0, 0, \pm R/2)$ liegen), zeigen Sie dass der Laplace-Operator $\Delta \equiv \nabla^2$ in diesen Koordinaten

$$\Delta = \frac{4}{R^2(\lambda^2 - \mu^2)} \left\{ \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[(\lambda^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \lambda} \right] + \frac{\partial}{\partial \mu} \left[(1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} \right] + \frac{\partial}{\partial \phi} \left[\frac{\lambda^2 - \mu^2}{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \right\}$$

ist und zeigen Sie, dass die Schrödingergleichung in diesen Koordinaten mit dem Ansatz $\Psi = L(\lambda) M(\mu) e^{im\phi}$ separiert.

2. **Grad, Div, Rot**

Sei $\mathbf{r} = (x, y, z)$ und $r \equiv |\mathbf{r}|$.

- (a) Berechnen Sie den Gradienten von $f_1(\mathbf{r}) = \frac{x^n}{r}$, $f_2(\mathbf{r}) = y^2 z$ und $f_3(\mathbf{r}) = e^{\mathbf{r} \cdot \mathbf{a}}$.
- (b) Berechnen Sie Divergenz und Rotation von $f \mathbf{A}$ wobei $f = f(\mathbf{r})$ eine skalare Funktion und $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{r})$ eine vektorwertige Funktion ist.

3. **Potentiale**

Für ein wirbelfreies Feld ($\nabla \times \mathbf{v} = \mathbf{0}$) kann man ein skalares Potential ϕ finden, sodass $\mathbf{v} = \nabla \phi$. Für ein quellenfreies Feld ($\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$) kann man ein Vektorpotential \mathbf{a} finden, sodass $\mathbf{v} = \nabla \times \mathbf{a}$. Der Hauptsatz der Vektoranalysis besagt, dass (unter bestimmten Voraussetzungen die hier nicht von Belang sein sollen) ein Vektorfeld $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ durch Angabe seiner Divergenz $\nabla \cdot \mathbf{v}$ und Rotation $\nabla \times \mathbf{v}$ eindeutig bestimmt ist.

Betrachten Sie ein Vektorfeld mit Quellen, $\nabla \cdot \mathbf{v} = q$, und Wirbeln $\nabla \times \mathbf{v} = \zeta$. Da ζ quellenfrei ist ($\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{v}) = 0$) lässt es sich als $\zeta = \nabla \times \mathbf{a}$ schreiben. Zeigen Sie, dass sich dann ein skalares Potential ϕ finden lässt, sodass $\mathbf{v} = \nabla \phi + \mathbf{a}$ gilt. Bestimmen Sie $\nabla^2 \phi$.

4. Basen

Es gelte die Einstein'sche Summenkonvention. Ein Vektor $\boldsymbol{x} = x^i \boldsymbol{e}_i$ sei durch seine Koordinaten x^i in der orthonormalen Basis \boldsymbol{e}_i beschrieben. Man führe nun einen Wechsel des Koordinatensystems zur neuen Basis $\boldsymbol{h}_i = t_i^j \boldsymbol{e}_j$ durch (der Einfachheit halber sei die Transformation ortsunabhängig).

- (a) Zeigen Sie, dass sich die (kontravarianten) Koordinaten gerade umgekehrt wie die (kovariante) Basis transformieren (inverse Transformation).
- (b) Die (zu einer kovarianten Basis \boldsymbol{e}_i gehörige) kontravariante Basis ist definiert durch $\boldsymbol{e}_i \boldsymbol{e}^j = g_i^j = \delta_i^j$. Zeigen Sie, dass sich die kontravariante Basis nicht wie die kovariante Basis sondern gerade invers transformiert (also wie die kontravarianten Koordinaten).
- (c) Stellen Sie die kontravariante Basis in der kovarianten Basis dar, zeigen Sie also $\boldsymbol{e}^k = g^{ki} \boldsymbol{e}_i$.