

Ferienkurs *Quantenmechanik* – Sommer 2009

Quantenmechanik in drei Dimensionen, Drehimpuls und Spin (Lösungen)

1 Drehimpulse und Drehimpulsalgebra

1.1 Transformation von Zuständen (*)

In der Vorlesung wurde gezeigt, dass die unitären Operatoren, die die Wirkung einer Drehung des Raumes auf den Zustandsraum beschreiben, von dem Drehimpulsoperator \vec{J} erzeugt werden. In dieser Aufgabe soll $\hbar = 1$ gesetzt werden, d. h. $\hbar\vec{J} = \vec{L}$.

- Zeigen Sie, dass

$$[J^2, J_i] = 0$$

für $i = x, y, z$ gilt.

LÖSUNG:

Für diese Aufgabe benötigt man die Drehimpulsalgebra

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k.$$

Die Behauptung folgt durch direktes Nachrechnen:

$$\begin{aligned} [J^2, J_i] &= [J_j J_j, J_i] = J_j [J_j, J_i] + [J_j, J_i] J_j \\ &= i\epsilon_{jik} (J_j J_k + J_k J_j) \\ &= \frac{i}{2} (\epsilon_{jik} (J_j J_k + J_k J_j) + \epsilon_{kij} (J_k J_j + J_j J_k)) \\ &= \frac{i}{2} (J_k J_j + J_j J_k) (\epsilon_{jik} - \epsilon_{jik}) = 0 \end{aligned}$$

- Zeigen Sie, dass das Quadrat des Impulsoperators $P^2 := P_i P_i$ mit allen Generatoren der $ISO(3)$ vertauscht.

LÖSUNG:

Wegen $[P_i, P_k] = 0$ gilt offensichtlich

$$[P^2, P_i] = 0$$

für alle $i = 1, 2, 3$. Für das Kommutieren mit allen Komponenten des Drehimpulsoperators soll zuerst das Transformationsgesetz für den Impulsoperator bei einer beliebigen $ISO(3)$ -Transformation U betrachtet werden:

$$U^{-1} \vec{P} U = R \cdot \vec{P},$$

wobei R die Drehmatrix ist. Nun ist aber R eine orthogonale Matrix, sodass folgt:

$$\vec{P}^2 = P_i P_i = P_j R_{ji}^T R_{ik} P_k = R_{ij} P_j R_{ik} P_k = U^{-1} P_i U U^{-1} P_i U = U^{-1} P^2 U$$

Somit folgt $[P^2, U] = 0$. Setzt man nun die infinitesimale Entwicklung von U um $\mathbb{1}$ ein, so folgt

$$[P^2, J_i] = 0.$$

- Alle Komponenten des Impulses kommutieren untereinander. Daher können diese alle gleichzeitig diagonalisiert werden, sodass man die Zustände anhand des Impulses unterscheiden kann. Zeigen Sie, dass sich bei der Verschiebung eines Zustandes $|\vec{p}\rangle$ um \vec{a} eine Phase $e^{-i\vec{p}\cdot\vec{a}}$ ergibt.

LÖSUNG:

Bei einer reinen Verschiebung lautet der unitäre Operator, der diese repräsentiert

$$U(\vec{a}) = \exp\left(-i\vec{P}\cdot\vec{a}\right).$$

Da nun der Zustand $|\vec{p}\rangle$ Eigenzustand von \vec{P} ist, folgt unmittelbar:

$$U(\vec{a})|\vec{p}\rangle = \exp\left(-i\vec{P}\cdot\vec{a}\right)|\vec{p}\rangle = e^{-i\vec{p}\cdot\vec{a}}|\vec{p}\rangle$$

□

- Neben den Impulsindizes gibt es noch weitere Indizes, die die Zustände durchindizieren. Berechnen Sie den Impuls eines Zustandes $|\vec{p}, i\rangle$ nach einer Drehung mit der Matrix R . Folgern Sie daraus, dass man den transformierten Zustand $U(R)|\vec{p}, i\rangle$ folgendermaßen schreiben kann

$$U(R)|\vec{p}, i\rangle = \sum_j \mathcal{D}(R)_{ji} |R\vec{p}, j\rangle,$$

wobei $\mathcal{D}(R)_{ji}$ geeignete Konstanten sind.

LÖSUNG:

Nach Vorlesung gilt für den Impulsoperator folgende Beziehung:

$$U(R)^{-1}\vec{P}U(R) = R\vec{P}$$

Durch Multiplikation von $U(R)$ von links geht diese Gleichung über in

$$\vec{P}U(R) = U(R)R\vec{P}$$

Damit kann der Impuls des transformierten Zustandes $U(R)|\vec{p}, i\rangle$ berechnet werden zu

$$\vec{P}U(R)|\vec{p}, i\rangle = U(R)R\vec{P}|\vec{p}, i\rangle = R\vec{p}U(R)|\vec{p}, i\rangle$$

Damit haben die transformierten Zustände den Impuls $R\vec{p}$ und der transformierte Zustand kann mit geeigneten Koeffizienten $\mathcal{D}(R)_{ji}$ geschrieben werden zu:

$$U(R)|\vec{p}, i\rangle = \sum_j \mathcal{D}(R)_{ji} |R\vec{p}, j\rangle$$

□

- Benutzen Sie die Tatsache, dass $U(R)$ eine Darstellung ist, also $U(RR') = U(R)U(R')$ gilt, sowie die Unitarität von $U(R)$, um zu zeigen, dass für die Zahlen $\mathcal{D}(R)_{ji}$ gelten

$$\delta_{ik} = \sum_j \mathcal{D}(R)_{ji}^* \mathcal{D}(R)_{jk}$$

muss, also die Matrizen $\mathcal{D}(R)$ unitär sind. Ferner erfüllen sie die Beziehung

$$\mathcal{D}(RR') = \mathcal{D}(R)\mathcal{D}(R').$$

Dies bedeutet, dass die $\mathcal{D}(R)$ eine unitäre Darstellung der Drehgruppe induzieren.

LÖSUNG:

Für diesen Beweis soll die Orthogonalität der $|\vec{p}, i\rangle$ für festes \vec{p} benutzt werden. Diese drückt sich so aus:

$$\delta_{ik} = \langle i, \vec{p} | \vec{p}, k \rangle = \langle i, \vec{p} | U^{-1}(R)U(R)\vec{p}, k \rangle = \langle i, \vec{p} | U^\dagger(R)U(R)\vec{p}, k \rangle$$

Unter Benutzung der Ergebnisse aus der vorherigen Teilaufgabe führt dies auf:

$$\delta_{ik} = \sum_{j'l} \langle j, R\vec{p} | \mathcal{D}(R)_{ji}^* \mathcal{D}(R)_{lk} | R\vec{p}, l \rangle = \sum_{j'l} \mathcal{D}(R)_{ji}^* \mathcal{D}(R)_{lk} \langle j, R\vec{p} | R\vec{p}, l \rangle$$

Unter Benutzung der Orthogonalität der Zustände mit gleichem Impuls folgt:

$$\delta_{ik} = \sum_j \mathcal{D}(R)_{ji}^* \mathcal{D}(R)_{jk}$$

Es bleibt noch zu zeigen, dass die Matrizen $\mathcal{D}(R)$ eine Darstellung der Drehgruppe bilden. Dazu kann man folgende Gleichung betrachten:

$$U(RR')|\vec{p}, i\rangle = U(R)U(R')|\vec{p}, i\rangle$$

Setzt man die bekannte Wirkung der Operatoren $U(R)$ auf Zustände ein, so folgt:

$$\sum_j \mathcal{D}(RR')_{ji} |RR'\vec{p}, j\rangle = U(R) \sum_k \mathcal{D}(R')_{ki} |R'\vec{p}, k\rangle = \sum_{k,j} \mathcal{D}(R')_{ki} \mathcal{D}(R)_{jk} |RR'\vec{p}, j\rangle$$

Nun ist der Index i beliebig, sodass hieraus folgt:

$$\mathcal{D}(RR')_{ji} = \sum_k \mathcal{D}(R)_{jk} \mathcal{D}(R')_{ki}$$

□

- Betrachten Sie nun Drehungen $L(\vec{n})$, die den Einheitsvektor in z -Richtung auf die Richtung \vec{n} abbilden. Ferner sei in einem Bezugssystem der Zustand $|p\vec{e}_z, i\rangle$ definiert. Man kann dann Zustände mit beliebiger Impulsrichtung $\vec{n} = \vec{p}/p$ folgendermaßen definieren:

$$|\vec{p} = p\vec{n}, i\rangle = U(L(\vec{n}))|p\vec{e}_z, i\rangle$$

Zeigen Sie, dass die Wirkung von $U(R)$ auf einen Zustand $|\vec{p}, i\rangle$ schreiben werden kann als

$$U(R)|\vec{p}, i\rangle = U(L(R\vec{p}/p))U(\Gamma_R(\vec{p}/p))|p\vec{e}_z, i\rangle$$

Hierbei ist $\Gamma_R(\vec{n}) := L^{-1}(R\vec{n})RL(\vec{n})$. Was ist die Wirkung von $\Gamma_R(\vec{n})$? Kann $\Gamma_R(\vec{n})$ von \vec{n} abhängen?

LÖSUNG:

Aus den Rechenregeln für Darstellungen folgt:

$$U(R) = U(L(R\vec{p}/p))U(L(R\vec{p}/p))^{-1}U(R) = U(L(R\vec{p}/p))U(L^{-1}(R\vec{p}/p)R)$$

Da nun $|\vec{p}, i\rangle = U(L(\vec{p}/p))|p\vec{e}_z, i\rangle$ ist, folgt hiermit:

$$U(R)|\vec{p}, i\rangle = U(L(R\vec{p}/p))U(L^{-1}(R\vec{p}/p)RL(\vec{p}/p))|p\vec{e}_z, i\rangle = U(L(R\vec{p}/p))U(\Gamma_R(\vec{p}/p))|p\vec{e}_z, i\rangle$$

Die Matrix $\Gamma_R(\vec{n})$ lässt die Richtung \vec{e}_z fix. Daher handelt es sich hierbei um eine Drehung um die z -Achse. Dieser Drehwinkel ist unabhängig von der Richtung \vec{n} .

- Angenommen, die Wirkung von $U(\Gamma(\phi = \phi(R)))$ sei bekannt und laute

$$U(\Gamma(\phi))|p\vec{e}_z, i\rangle = \sum_j \mathcal{G}(\phi)_{ji} |p\vec{e}_z, j\rangle$$

Zeigen Sie, dass sich damit die Wirkung einer allgemeinen $ISO(3)$ -Transformation schreiben lässt als:

$$U(R, \vec{a})|\vec{p}, i\rangle = e^{-i(R\vec{p})\cdot\vec{a}} \sum_j \mathcal{G}(\phi)_{ji} |R\vec{p}, j\rangle$$

LÖSUNG:

Nach vorheriger Aufgabe ist die Wirkung von $U(R)$

$$U(R)|\vec{p}, i\rangle = U(L(R\vec{p}/p)) \sum_j \mathcal{G}(\phi)_{ji} |p\vec{e}_z, j\rangle = \sum_j \mathcal{G}(\phi)_{ji} |R\vec{p}, j\rangle$$

Mit der berechneten Wirkung des Translationsoperators $U(\vec{a})$ und dem Gruppenadditionsgesetz

$$U(R, \vec{a}) = U(\vec{a})U(R)$$

ergibt sich die Behauptung

$$U(R, \vec{a})|\vec{p}, i\rangle = e^{-i(R\vec{p})\cdot\vec{a}} \sum_j \mathcal{G}(\phi)_{ji} |R\vec{p}, j\rangle$$

□

1.2 Addition von Drehimpulsen (**)

Häufig treten in der Physik Probleme auf, in denen zwei Drehimpulse miteinander zu einem Gesamtdrehimpuls koppeln. Dies tritt beispielsweise bei der Kopplung des Spins \vec{S} und des Bahndrehimpulses \vec{L} zum Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ auf.

- Leiten Sie für ein System mit Drehimpuls $l = 1$ die Matrixdarstellung der Operatoren L_x , L_y und L_z in der Basis $|l = 1, m = +1\rangle$, $|l = 1, m = 0\rangle$, $|l = 1, m = -1\rangle$ ab.

LÖSUNG:

In dieser Basis ist der Operator L_z diagonal und nimmt die Form

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

an. Um die Operatoren L_x und L_y zu berechnen, beschafft man sich zuerst die Darstellung der Leiteroperatoren L_{\pm} , die gemäß Vorlesung die Relation

$$L_{\pm}|l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}|l, m \pm 1\rangle$$

erfüllen. Daher folgt für deren Matrixdarstellung:

$$L_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

Aus der Definition der Leiteroperatoren $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ folgt dann für L_x und L_y :

$$L_x = \frac{L_+ + L_-}{2} = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$L_y = \frac{L_+ - L_-}{2i} = \frac{i\hbar\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- Berechnen Sie nun die Matrixdarstellung des Operators $\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$, wobei \vec{L}_1 und \vec{L}_2 die Drehimpulse eines Spin-1-Systems in der Basis $|m = 1\rangle \otimes |m = 1\rangle$, $|m = 1\rangle \otimes |m = 0\rangle$, $|m = 1\rangle \otimes |m = -1\rangle$, $|m = 0\rangle \otimes |m = 1\rangle$, $|m = 0\rangle \otimes |m = 0\rangle$, $|m = 0\rangle \otimes |m = -1\rangle$, $|m = -1\rangle \otimes |m = 1\rangle$, $|m = -1\rangle \otimes |m = 0\rangle$, $|m = -1\rangle \otimes |m = -1\rangle$ ist, für jeden Einzelzustand gilt $l = 1$.

LÖSUNG:

Die Rechnung soll hier nur für den Operator L_x durchgeführt werden. Die restlichen Rechnungen verlaufen analog. Der Operator L_x lautet ausgeschrieben

$$L_x = \mathbb{1} \otimes L_{x,2} + L_{x,1} \otimes \mathbb{1}.$$

Führt man diese Tensorproduktbildung aus, so erhält man:

$$L_x = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2} \left(\left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right) + \left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \right)$$

$$= \frac{\hbar\sqrt{2}}{2} \left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right)$$

Analog findet man folgende Matrixdarstellungen für L_y und L_z :

$$L_y = \frac{i\hbar\sqrt{2}}{2} \left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right)$$

$$L_z = \hbar \left(\begin{array}{ccc|ccc|ccc} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{array} \right)$$

- Der Operator \vec{L}^2 hat die Eigenwerte 0 , $2\hbar^2$ (dreifach entartet) und $6\hbar^2$ (fünffach entartet). Geben Sie von den auftretenden Drehimpulsmultipletts jeweils die Drehimpulsquantenzahl l an und bestimmen Sie deren Multiplizität. Sind die Ergebnisse konsistent? Welche Eigenwerte und welchen Entartungsgrad erwarten Sie für Drehimpuls 3 – Drehimpuls 5 – Kopplung?

LÖSUNG:

Der Drehimpulsquadratoperator hat Eigenwerte der Form $\hbar^2 l(l+1)$. Mit den angegebenen Werten

führt dies auf ein $l = 0$ -Singlett, ein $l = 1$ -Triplet und ein $l = 2$ -Quintett. Addiert man die Multiplizitäten $1 + 3 + 5 = 9$ auf, so erhält man das Produkt der Multiplizitäten $3 \times 3 = 9$ der Ausgangsdrehimpulse.

Für Drehimpuls 3 und Drehimpuls 5 Kopplung treten nach Vorlesung alle Drehimpulse l mit $|5-3| \leq l \leq 5+3$ auf. Folglich gibt es ein $l = 2$ Quintett, ein $l = 3$ Septett, ein $l = 4$ Nonett, ein $l = 5$ Undekuplett, ein $l = 6$ Tridekuplett, ein $l = 7$ Quintdekuplett und ein $l = 8$ Septdekuplett. Die Summenüberprüfung ergibt:

$$5 + 7 + 9 + 11 + 13 + 15 + 17 = 77 = 7 \times 11$$

- Welche Phase entsteht bei einer Drehung um den Winkel ϕ um die z -Achse eines Zustandes mit der magnetischen Quantenzahl m ? Berechnen Sie den unitären Operator, der die Drehung eines $l = 1$ -Triplets um die x -Achse um den Winkel ϕ darstellt.

LÖSUNG:

Der Operator L_z generiert die Drehungen um die z -Achse. Laut Vorlesung entsteht somit eine Phase von $e^{-im\phi}$.

Für den unitären Operator, der die Drehung um die x -Achse erzeugt, soll die Matrixdarstellung berechnet werden. Es folgt:

$$U(\phi) = \exp\left(-i\frac{L_x\phi}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{-i\sqrt{2}}{2}\phi \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\right)$$

Zuerst sollen einige Potenzen von $M = L_x/\hbar$ berechnet werden:

$$Q := M^2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$M^3 = \left(\frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\right)^3 = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = M$$

Man liest folgende Relationen ab:

$$M^0 = \mathbb{1}, M^1 = M, M^2 = Q, M^3 = M, M^4 = Q, \dots M^{2n} = Q, M^{2n+1} = M$$

Umordnen der Exponentialreihe ergibt somit:

$$\begin{aligned} U(\phi) &= \mathbb{1} - i\phi M + i\frac{\phi^3}{3!}M + \dots - \frac{\phi^2}{2!}Q + \frac{\phi^4}{4!}Q + \dots \\ &= \mathbb{1} - iM \left(\phi - \frac{1}{3!}\phi^3 + \dots\right) + Q \left(-\frac{1}{2!}\phi^2 + \frac{1}{4!}\phi^4 + \dots\right) \\ &= \mathbb{1} - iM \sin \phi + Q (\cos \phi - 1) \\ &= \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\phi}{2} & -i\frac{\sqrt{2}}{2} \sin \phi & -\sin^2 \frac{\phi}{2} \\ -i\frac{\sqrt{2}}{2} \sin \phi & \cos \phi & -i\frac{\sqrt{2}}{2} \sin \phi \\ -\sin^2 \frac{\phi}{2} & -i\frac{\sqrt{2}}{2} \sin \phi & \cos^2 \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

2 Spin

2.1 Eigenschaften der Paulischen Spinmatrizen (**)

Es seien I , σ_1 , σ_2 und σ_3 hermitesche 2×2 -Matrizen, wobei I die Einheitsmatrix ist. Ferner erfüllen die Matrizen folgende Relation:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$$

Hierbei bezeichnet $\{A, B\} = AB + BA$ den Antikommutator der Matrizen A und B . Zeigen Sie folgende Eigenschaften der Matrizen σ_i , ohne eine explizite Darstellung zu verwenden:

- Die Spuren jeder Matrix verschwindet:

$$\text{tr}(\sigma_i) = 0$$

LÖSUNG:

Aus der Antikommutatorrelation der Paulimatrizen folgt

$$\sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i \quad (i \neq j), \quad \sigma_i \sigma_i = I$$

Damit folgt unmittelbar:

$$\sigma_i = \sigma_i \sigma_j \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i \sigma_j \quad (i \neq j)$$

Folglich gilt:

$$\text{tr}(\sigma_i) = -\text{tr}(\sigma_j \sigma_i \sigma_j) = -\text{tr}(\sigma_i \sigma_j \sigma_j) = -\text{tr}(\sigma_i)$$

und somit

$$\text{tr}(\sigma_i) = 0$$

- Die Eigenwerte der σ_i sind ± 1 und es gilt $\det(\sigma_i) = -1$.

LÖSUNG:

Angenommen die Matrix σ_i habe den Eigenvektor v und den Eigenwert λ , also

$$\sigma_i v = \lambda v.$$

Dann gilt aber:

$$v = I v = \sigma_i \sigma_i v = \sigma_i \lambda v = \lambda^2 v$$

Da $v \neq 0$ ist, muss daher

$$\lambda^2 = 1$$

sein. Also sind die Eigenwerte der σ_i ± 1 . Dabei müssen beide Vorzeichen angenommen werden, da σ_i nach vorherigem Aufgabenteil spurlos ist und für die Spur einer Matrix gilt:

$$\text{tr}(M) = \sum_i \lambda_i.$$

Nun gilt der aus der linearen Algebra bekannte Zusammenhang zwischen der Determinante und den Eigenwerten einer Matrix:

$$\det(M) = \prod_i \lambda_i$$

Daher folgt unmittelbar

$$\det(\sigma_i) = -1.$$

- Die Matrizen σ_i und I sind alle linear unabhängig und daher kann jede 2×2 -Matrix als Linearkombination jener Matrizen dargestellt werden:

$$M = m_0 I + \sum_{i=1}^3 m_i \sigma_i$$

Geben Sie einen Ausdruck für die Koeffizienten m_i ($i = 0, 1, 2, 3$) an.

LÖSUNG:

Angenommen die vier Matrizen I, σ_i sind linear abhängig. Dann können Zahlen m_0, m_i derart gewählt werden, dass

$$m_0 I + \sum_{i=1}^3 m_i \sigma_i = 0,$$

wobei eine der Zahlen nicht null ist. Multipliziert man diese Gleichung von rechts bzw. von links mit σ_j , so ergeben sich folgende Gleichungen:

$$m_0\sigma_j + \sum_{i=1}^3 m_i\sigma_i\sigma_j = 0$$

$$m_0\sigma_j + \sum_{i=1}^3 m_i\sigma_j\sigma_i = 0$$

Addiert man nun diese beiden Gleichungen, so ergibt sich:

$$2m_0\sigma_j + \sum_{i=1}^3 m_i\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2m_0\sigma_j + 2m_jI = 0$$

Durch Spurbildung ergibt sich daher:

$$0 = m_0\text{tr}(\sigma_j) + m_j = m_j$$

Da nun aber eine der Zahlen m_0, m_i nicht null ist, muss dies zwangsläufig m_0 sein, wobei alle anderen m_i null sind. Daher folgt

$$I = 0,$$

was offensichtlich ein Widerspruch ist. Somit sind alle σ_i und I linear unabhängig.

Sei M eine 2×2 -Matrix. Nach vorherigem Aufgabenteil gibt es Zahlen m_0, m_i mit folgender Eigenschaft:

$$M = m_0I + \sum_{i=1}^3 m_i\sigma_i$$

Durch Spurbildung obiger Gleichung ergibt sich:

$$m_0 = \frac{1}{2}\text{tr}(M)$$

Zur Bestimmung der m_i kann beispielsweise der Antikommutator der Matrix M mit der Matrix σ_j berechnet werden:

$$\{\sigma_j, M\} = m_0\{\sigma_j, I\} + \sum_{i=1}^3 m_i\{\sigma_j, \sigma_i\} = 2m_0\sigma_j + 2m_jI$$

Spurbildung liefert:

$$\text{tr}(\{\sigma_j, M\}) = 2\text{tr}(\sigma_j M) = 4m_j$$

Folglich sind die m_i gegeben durch:

$$m_i = \frac{1}{2}\text{tr}(\sigma_i M)$$

2.2 Elektron im Magnetfeld (**)

Ein Elektron befinde sich in einem äußeren, homogenen Magnetfeld der Stärke $\vec{B} = B\vec{n}$. Ein Elektron besitzt ein nicht verschwindendes magnetisches Moment $\vec{\mu} = -e\vec{S}/m$. Hierbei ist \vec{S} der Spin des Elektrons.

- Bestimmen Sie anhand des Korrespondenzprinzips den Hamiltonoperator des Systems.

LÖSUNG:

Die potentielle Energie eines klassischen magnetischen Moments im Magnetfeld ist gegeben durch $V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Nach dem Korrespondenzprinzip lautet der Hamiltonoperator des Elektronensystems daher:

$$H = \frac{e\hbar B}{2m} \vec{n} \cdot \vec{\sigma}$$

- Wie lautet die Schrödingergleichung dieses Systems? Zeigen Sie, dass der Zustand des Systems zum Zeitpunkt t gegeben ist durch:

$$|\Psi(t)\rangle = \left(\cos \frac{\omega t}{2} - i \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin \frac{\omega t}{2} \right) |\Psi(0)\rangle$$

Hierbei bezeichnet $\omega = eB/m$ die klassische Präzessionsfrequenz des magnetischen Moments.

LÖSUNG:

Die Schrödingergleichung lautet:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle$$

Die formale Lösung dieser Gleichung ist gegeben durch:

$$|\Psi(t)\rangle = \exp \left(-i \frac{Ht}{\hbar} \right) |\Psi(0)\rangle$$

Im nächsten Schritt muss die Exponentialfunktion berechnet werden. Dazu kann man zuerst folgenden Ausdruck betrachten:

$$(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})(\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) = \sum_{i,j} n_i n_j \sigma_i \sigma_j = \frac{1}{2} \sum_{i,j} n_i n_j \{\sigma_i, \sigma_j\} = \sum_{i,j} n_i n_j \delta_{ij} = \vec{n}^2 = 1$$

Nun gilt nach Definition der Exponentialfunktion:

$$\begin{aligned} \exp \left(-i \frac{Ht}{\hbar} \right) &= \exp \left(-i \frac{\omega \vec{n} \cdot \vec{\sigma} t}{2} \right) \\ &= 1 - i \frac{\omega t}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma} - \frac{1}{2} \left(\frac{\omega t}{2} \right)^2 (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^2 + \frac{1}{3!} i \left(\frac{\omega t}{2} \right)^3 (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^3 + \dots \\ &= \left(1 - \frac{1}{2} \frac{\omega t}{2} + \dots \right) - i \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \left(\frac{\omega}{t} - \frac{1}{3!} \left(\frac{\omega t}{2} \right) + \dots \right) \\ &= \cos \frac{\omega t}{2} - i \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin \frac{\omega t}{2} \end{aligned}$$

Damit folgt unmittelbar die behauptete Darstellung des Zustands zur Zeit t .

- Berechnen Sie den Erwartungswert $\langle \Psi(t) | \vec{\mu} | \Psi(t) \rangle$ des magnetischen Moments. Sie können hierfür das Magnetfeld in z -Richtung legen.

LÖSUNG:

Laut Aufgabenstellung kann man das Magnetfeld in z -Richtung legen. Es ist sinnvoll, den Zustandsvektor $|\Psi(0)\rangle$ durch Eigenvektoren der Paulimatrix σ_z darzustellen:

$$|\Psi(0)\rangle = a |\sigma_z = 1\rangle + b |\sigma_z = -1\rangle =: \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Dies ist stets möglich, da σ_z hermitesch ist. Man beachte ferner, dass die Eigenwerte von σ_z nach vorangegangener Aufgabe ± 1 sind. Der Zustand zur Zeit t ist somit gegeben durch:

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\omega t}{2} - i \sin \frac{\omega t}{2} & 0 \\ 0 & \cos \frac{\omega t}{2} + i \sin \frac{\omega t}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i \frac{\omega t}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i \frac{\omega t}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Nun kann man die Erwartungswerte der Paulimatrizen berechnen und findet nach kurzer Rechnung unter Verwendung der expliziten Darstellung der Paulimatrizen:

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | \sigma_1 | \Psi(t) \rangle &= 2\Re(\bar{a}b) \cos \omega t - 2\Im(\bar{a}b) \sin \omega t \\ \langle \Psi(t) | \sigma_2 | \Psi(t) \rangle &= 2\Re(\bar{a}b) \sin \omega t + 2\Im(\bar{a}b) \cos \omega t \\ \langle \Psi(t) | \sigma_3 | \Psi(t) \rangle &= |a|^2 - |b|^2 \end{aligned}$$

Mit diesen Gleichungen kann der Erwartungswert des magnetischen Moments mit $\vec{\mu} = -\frac{e\hbar}{2m}\vec{\sigma}$ berechnet werden zu:

$$\begin{aligned}\langle \vec{\mu} \rangle(t) &= -\frac{e\hbar}{2m} \begin{pmatrix} 2\Re(\bar{a}b) \cos \omega t - 2\Im(\bar{a}b) \sin \omega t \\ 2\Re(\bar{a}b) \sin \omega t + 2\Im(\bar{a}b) \cos \omega t \\ |a|^2 - |b|^2 \end{pmatrix} \\ &= -\frac{e\hbar}{2m} \begin{pmatrix} \cos \omega t & -\sin \omega t & 0 \\ \sin \omega t & \cos \omega t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2\Re(\bar{a}b) \\ 2\Im(\bar{a}b) \\ |a|^2 - |b|^2 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Aus dieser Darstellung des Erwartungswertes des magnetischen Moments erkennt man deutlich die Präzession um die Richtung des magnetischen Moments.

- Überlegen Sie sich, wie man eine formale Lösung der Schrödingergleichung für den Fall eines zeitlich variierenden magnetischen Feldes finden kann. Berechnen Sie für ein magnetisches Feld der Form $\vec{B}(t) = B_0\omega_0 t \vec{e}_x$ die Wahrscheinlichkeit, einen Spin-Up-Zustand nach einer Zeit t im Spin-Down-Zustand zu finden. Sie können annehmen, dass $e\hbar B_0/2m\omega_0 \ll 1$ und $\omega_0 t \ll 1$ gilt.

LÖSUNG:

Die Schrödingergleichung nimmt auch für zeitlich nicht konstante Magnetfelder dieselbe Form an:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle$$

Durch Integration von $t = 0$ bis t ergibt sich dann:

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi(0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t H(t) |\Psi(t)\rangle dt$$

Zur Lösung dieser Integralgleichung kann man folgendermaßen vorgehen: Man definiert eine Folge von Zuständen $|\Psi(t)\rangle_n$:

$$\begin{aligned}|\Psi(t)\rangle_0 &= |\Psi(0)\rangle \\ |\Psi(t)\rangle_{n+1} &= |\Psi(0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t H(t) |\Psi(t)\rangle_n dt, \quad n \geq 0\end{aligned}$$

Man kann zeigen, dass unter gewissen Voraussetzungen an den Operator $H(t)$ eine Umgebung U von $t = 0$ existiert, in dem die Folge $|\Psi(t)\rangle_n$ von Zuständen gegen die, lokal eindeutige Lösung $|\Psi(t)\rangle$ der Schrödingergleichung konvergiert. Die $|\Psi(t)\rangle_n$ heißen *n-te Picard-Iterierte*. Durch wiederholtes Einsetzen vorheriger Approximationen findet man für $|\Psi(t)\rangle_n$ folgenden expliziten Ausdruck:

$$\begin{aligned}|\Psi(t)\rangle_n &= \left(1 + \sum_{k=1}^n \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^k \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{k-1}} dt dt_1 \dots dt_{n-1} H(t) H(t_1) \dots H(t_{n-1}) \right) |\Psi(0)\rangle \\ &= \left(1 + \sum_{k=1}^n \frac{1}{k!} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^k \int_{[0,t]^k} dt dt_1 \dots dt_{k-1} \mathcal{T}(H(t_1) H(t_2) \dots H(t_k)) \right) |\Psi(0)\rangle \\ |\Psi(t)\rangle &= \lim_{n \rightarrow \infty} |\Psi(t)\rangle_n = \mathcal{T} \exp \left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t H(t) dt \right) |\Psi(0)\rangle = U(t) |\Psi(0)\rangle\end{aligned}$$

In dieser Formel bezeichnet \mathcal{T} das zeitgeordnete Produkt: $\mathcal{T}(f(t_1)g(t_2)) = \Theta(t_1 - t_2)f(t_1)g(t_2) + \Theta(t_2 - t_1)g(t_2)f(t_1)$.

Nun kann die Entwicklung des Systems, das sich zur Zeit $t = 0$ im Zustand $|\sigma_z = 1\rangle$ befand, näherungsweise berechnet werden, wobei hier lediglich die erste Iterierte betrachtet werden soll:

$$\begin{aligned}|\Psi(t)\rangle &= |\sigma_z = 1\rangle + \frac{ieB_0}{2m} \int_0^t \omega_0 t \sigma_x |\sigma_z = 1\rangle dt + O \left(\left(\frac{ieB_0}{2m\omega_0} \right)^2 \right) \\ &= |\sigma_z = 1\rangle + \frac{ieB_0\omega_0}{4m} t^2 |\sigma_z = -1\rangle + O \left(\left(\frac{ieB_0}{2m\omega_0} \right)^2 \right)\end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass man den Zustand Spin-Down findet ist folglich:

$$P(\sigma_z = -1)(t) = \left(\frac{eB_0\omega_0}{4m}\right)^2 t^4 + O\left(\left(\frac{ieB_0}{2m\omega_0}\right)^4\right)$$

3 Probleme in drei Dimensionen

3.1 Das Schalenmodell der Kernphysik (**)

In dieser Aufgabe soll das Schalenmodell aus der Kernphysik besprochen werden. In diesem Modell wird die komplexe Wechselwirkung zwischen den A Nukleonen folgendermaßen genähert: Man betrachtet zunächst ein Nukleon und betrachtet es als ein Teilchen, das sich in einem Potential bewegt, das von den anderen $A - 1$ Nukleonen erzeugt wird. Im Schalenmodell verwendet man zur Beschreibung dieses Potential normalerweise ein sogenanntes *Woods-Saxon-Potential*:

$$V(r) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right)}$$

Hierbei ist V_0 die Potentialtiefe, r der Abstand von der Kernmitte, a ein Parameter, der die Randdicke beschreibt und $R = r_0 A^{1/3}$ der Radius des Kerns. Dieses Modell liefert auch quantitativ gute Aussagen bezüglich der Stabilität der Kerne und liefert auch die korrekten magischen Zahlen. Allerdings ist die Schrödingergleichung mit diesem Potential nicht in geschlossener Form lösbar und es soll hier ein harmonisches Potential zur Modellierung der Kernkräfte verwendet werden:

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \tag{1}$$

In dieser Aufgabe soll das Schalenmodell mit diesem Parameter untersucht werden.

- Stellen Sie die Schrödingergleichung für dieses Problem auf.

LÖSUNG:

Es handelt sich hierbei um ein stationäres Problem. Daher lautet die zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$\mathcal{H}|\Psi\rangle = \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right)|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

- Begründen Sie, warum dieses Problem durch Aufspaltung des Zustandes in einen Radialanteil $|r\rangle$ und einen Winkelanteil $|\theta, \phi\rangle$ vereinfacht werden kann.

LÖSUNG:

Unter Drehungen R des dreidimensionalen Raumes transformieren sich die Operatoren \vec{r} und \vec{p} laut Vorlesung wie folgt:

$$\begin{aligned} U^{-1}(R) \vec{p} U(R) &= R\vec{p} \\ U^{-1}(R) \vec{r} U(R) &= R\vec{r} \end{aligned}$$

Die letzte Zeile folgt unmittelbar aus der Definition der Drehung im Raum. Analog wie in der Vorlesung folgt nun

$$[\mathcal{H}, U(R)] = 0.$$

Durch Übergang zu infinitesimalen Drehungen ergibt sich, dass der Hamiltonoperator mit dem Operator des Drehimpulses kommutiert. Daher besitzen der Hamiltonoperator und einer der Drehimpulskomponenten simultane Eigenwerte. Zusätzlich kann gleichzeitig \vec{L}^2 diagonalisiert werden. Da nun die Zustände durch die Eigenwerte dieser Operatoren indiziert werden können, separiert das Problem in einen Radial- und einen Winkelanteil.

- In der Ortsdarstellung kann der Zustand $\Psi(r, \theta, \phi) = u(r)f(\theta, \phi)$ geschrieben werden. Wie lauten die Funktionen $f(\theta, \phi)$ in einem Eigenzustand von L_z und L^2 ? Geben Sie eine Differentialgleichung für die Funktion $u(r)$ an.

LÖSUNG:

Ist $\Psi(r, \theta, \phi)$ ein Eigenzustand von L_z zum Eigenwert $m\hbar$ und von L^2 zum Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$, so muss die Funktion $f(\theta, \phi)$ gleich der Kugelflächenfunktion $Y_m^l(\theta, \phi)$ sein. Laut Vorlesung lautet die Differentialgleichung für $u(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r u(r) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \right) u(r) = E u(r)$$

- Finden Sie durch Untersuchen des asymptotischen Verhaltens und unter Benutzung der Randbedingungen einen geeigneten Ansatz zur Lösung der Differentialgleichung für den Radialteil $u(r)$. Hinweis: Versuchen Sie im Limes $r \rightarrow \infty$ einen Ansatz als Gaußfunktion. Beachten Sie, dass in diesem Limes konstante Terme gegenüber Potenzen von r irrelevant sind.

LÖSUNG:

Zuerst soll der Limes $r \rightarrow \infty$ betrachtet werden. In diesem Limes spielt lediglich noch das harmonische Potential eine Rolle. In diesem Limes wird durch die Gleichung

$$r u_\infty(r) = \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)$$

die asymptotische Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (r u_\infty)'' + \left(\frac{1}{2} m\omega^2 r^2 - \frac{\hbar\omega}{2} \right) r u_\infty = 0$$

gelöst.

Im Limes $r \rightarrow 0$ erhält man wieder die Eulersche Differentialgleichung

$$r^2 (ru)'' = l(l+1)(ru).$$

Mit den gleichen Argumenten, wie in der Vorlesung wird zum Ansatz die Funktion $ru_0(r) = r^{l+1}$ ausgewählt. Ein vollständiger Ansatz ist somit:

$$u(r) = f(r) r^l \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)$$

- Verwenden Sie den Ansatz und finden Sie eine Differentialgleichung für die unbestimmte Funktion Ihres Ansatzes. Hinweis: Ein möglicher Ansatz ist

$$u(r) = f(r) r^l \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right)$$

LÖSUNG:

Der Ansatz aus vorheriger Aufgabe liefert nach Einsetzen in die Differentialgleichung für $u(r)$:

$$\begin{aligned} & \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 - E \right) r u(r) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} r u(r) \\ &= \frac{\partial}{\partial r} \left(f'(r) r^{l+1} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right) + (l+1) f(r) r^l \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right) - f(r) r^{l+1} \frac{m\omega r}{\hbar} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right) \right) \\ &= f''(r) r^{l+1} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right) + 2(l+1) f'(r) r^l \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right) - 2f'(r) r^{l+1} \frac{m\omega r}{\hbar} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right) \\ &+ l(l+1) f(r) r^{l-1} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right) - 2(l+1) f(r) r^l \frac{m\omega r}{\hbar} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right) \\ &+ f(r) r^{l+1} \left(\frac{m\omega r}{\hbar} \right)^2 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right) - f(r) r^{l+1} \frac{m\omega}{\hbar} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right) \end{aligned}$$

Vereinfachen dieses Ausdruckes liefert folgende Differentialgleichung:

$$f''(r)r + f'(r) \left(2(l+1) - 2\frac{m\omega r^2}{\hbar} \right) - f(r) \frac{m\omega r}{\hbar} (2(l+1) + 1) + \frac{2mE}{\hbar^2} f(r)r = 0$$

- Machen Sie nun einen Polynomansatz

$$f(r) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n$$

und bestimmen Sie eine Rekursionsformel für die Koeffizienten a_n . Warum muss die Rekursion abbrechen? Wie lautet die Bedingung für den Abbruch? Geben Sie die möglichen Energien des harmonischen Oszillators abhängig vom Grade des Polynoms $f(r)$ und vom Wert der Drehimpulsquantenzahl l an.

LÖSUNG:

Einsetzen des Polynomansatzes in die Differentialgleichung für $f(r)$ liefert:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n n(n-1)r^{n-1} + \sum_{n=0}^{\infty} a_n n r^{n-1} \left(2(l+1) - 2\frac{m\omega r^2}{\hbar} \right) - \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n \frac{m\omega r}{\hbar} (2(l+1) + 1) + \sum_{n=0}^{\infty} a_n r^n \frac{2mEr}{\hbar^2} = 0$$

Eine Indexverschiebung in den Summen führt auf folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} & \sum_{n=-1}^{\infty} a_{n+1} n(n+1)r^n + \sum_{n=-1}^{\infty} a_{n+1} (n+1)r^n 2(l+1) - \sum_{n=1}^{\infty} a_{n-1} (n-1)r^n 2\frac{m\omega}{\hbar} \\ & - \sum_{n=1}^{\infty} a_{n-1} r^n \frac{m\omega}{\hbar} (2(l+1) + 1) + \sum_{n=1}^{\infty} a_{n-1} r^n \frac{2mE}{\hbar^2} = 0 \end{aligned}$$

Dies führt auf eine Rekursionsformel:

$$a_{n+1} = a_{n-1} \frac{2m\omega}{\hbar} \frac{n+l+\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}}{(n+1)(n+2(l+1))}$$

Ähnlich wie in der Vorlesung muss diese Rekursion abbrechen und liefert daher als mögliche Energien:

$$E = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + n + l \right)$$

In diesem Fall hat das Polynom den Grad $n-1 = m$. Folglich lauten die Energien des harmonischen Oszillators:

$$E(m, l) = \hbar\omega \left(\frac{3}{2} + m + l \right)$$

Allerdings muss man noch beachten, dass die Rekursionsvorschrift für den Term zur Potenz r^0 etwas anders lautet:

$$a_1 2(l+1) = 0$$

Folglich können nur gerade Potenzen auftreten. Nun der Grad des Polynoms ist insbesondere gerade. Die entgeltige Energie ist somit:

$$E(2m, l) = \hbar\omega \left(\frac{3}{2} + 2m + l \right)$$

- Die Schrödingergleichung für das harmonische Potential lässt sich noch auf einem anderen Weg lösen. Zerlegen sie den Hamiltonoperator des Problems in kartesischen Koordinaten in drei formal identische Operatoren und geben Sie eine Lösung des Problems an, indem Sie die Wellenfunktionen des eindimensionalen harmonischen Oszillators $\psi_n(x)$ als gegeben annehmen können. Wie lauten die Eigenenergien des Systems?

LÖSUNG:

In kartesischen Koordinaten lautet der Hamiltonoperator:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) = \mathcal{H}_1(x) + \mathcal{H}_1(y) + \mathcal{H}_1(z)$$

Mit einem Produktansatz $\Psi(x, y, z) = \psi_k(x)\psi_l(y)\psi_m(z)$ ergibt die Schrödingergleichung die Energien:

$$E(k, l, m) = \hbar\omega \left(\frac{3}{2} + k + l + m \right)$$

- Berechnen jeweils Sie die Entartungsgrade für die Zustände aus der letzten Aufgabe und aus der Aufgabe zuvor. Vergleichen Sie beide Ergebnisse. Liefern beide Ansätze konsistente Ergebnisse?

LÖSUNG:

Zuerst soll der Entartungsgrad für die Energien aus der Behandlung als Produktsystem dreier einfacher harmonischer Oszillatoren berechnet werden. Die einzelnen Zustände werden durch drei ganze Zahlen n , m und l indiziert. Alle Zustände mit $n + m + l = N$ haben die gleiche Energie, wie man aus der Formel sofort erkennt. Deren Anzahl ist:

$$g(N) = \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^{N-n} 1 = \sum_{n=0}^N N + 1 - n = (N + 1)^2 - \frac{1}{2} N(N + 1) = \frac{1}{2} (N + 1)(N + 2)$$

Im folgenden soll nun die Energieentartung für den Fall des rotationssymmetrischen Systems berechnet werden. Werden die Zustände mit n , l und m abgezählt. Es gilt stets, dass $|m| \leq l$ sein muss. Alle Zustände mit $N = 2n + l$ sind energetisch entartet, während aufgrund der Struktur des Drehimpulses eine weitere Entartung von $2l + 1$ hinzukommt. Die Entartung ist somit:

$$\begin{aligned} g(N) &= \sum_{2n+l=N} (2l + 1) = \sum_{n=0}^{\lfloor \frac{N}{2} \rfloor} (2(N - 2n) + 1) = (2N + 1) \left(1 + \lfloor \frac{N}{2} \rfloor \right) - 2 \left(1 + \lfloor \frac{N}{2} \rfloor \right) \lfloor \frac{N}{2} \rfloor \\ &= \left(1 + \lfloor \frac{N}{2} \rfloor \right) \left(2N + 1 - 2 \lfloor \frac{N}{2} \rfloor \right) = \frac{1}{2} (N + 2)(N + 1) \end{aligned}$$

Hierbei wurde im letzten Schritt ausgenutzt, dass $\lfloor N/2 \rfloor = N/2$ im Fall dass N gerade ist und $\lfloor N/2 \rfloor = (N - 1)/2$ sonst ist.

Beide Ansätze liefern das gleiche Ergebnis. Dies ist nicht verwunderlich, da die Physik nicht von der konkreten Formulierung des Problems abhängen darf.

- Jeder Zustand im Atomkern darf von je zwei Protonen und zwei Neutronen besetzt werden. Geben Sie die Grundzustandsenergien sowie die besetzten Niveaus im Grundzustand von ${}^4\text{He}$ (2 Neutronen, 2 Protonen), ${}^3\text{He}$ (1 Neutron, 2 Protonen), ${}^{12}\text{C}$ (6 Neutronen, 6 Protonen), ${}^5\text{Li}$ (2 Neutronen, 3 Protonen, kommt nicht in der Natur vor), ${}^5\text{He}$ (3 Neutronen, 2 Protonen) an. ${}^5\text{Li}$ zerfällt in ${}^5\text{He}$. Wie groß ist die freiwerdende Energie? Nehmen Sie an, dass die Oszillatorfrequenz ω für alle Atome gleich ist.

LÖSUNG:

Isotop	Grundzustandskonfiguration	Grundzustandsenergie $E/\hbar\omega$
${}^4\text{He}$	$p(1s, 1s)n(1s, 1s)$	6
${}^3\text{He}$	$p(1s, 1s)n(1s)$	9/2
${}^{12}\text{C}$	$p(1s, 1s, 1p, 1p, 1p, 1p)n(1s, 1s, 1p, 1p, 1p, 1p)$	26
${}^5\text{Li}$	$p(1s, 1s, 1p)n(1s, 1s)$	17/2
${}^5\text{He}$	$p(1s, 1s)n(1s, 1s, 1p)$	17/2

Bei Zerfall von ${}^5\text{Li}$ wird bei diesem Modell keine Energie frei, da Neutronen und Protonen gleich behandelt werden. Tatsächlich müsste beispielsweise die abstoßende Coulombwechselwirkung mit berücksichtigt werden. Ferner ist die Oszillatorfrequenz mit Sicherheit nicht für alle Atome gleich.

3.2 Erwartungswerte und Drehimpulse im harmonischen Oszillator (***)

Betrachten Sie einen dreidimensionalen harmonischen Oszillator. Der Oszillator befinde sich im Zustand mit $n = 2$, $l = 1$ und $m = 0$.

- Geben Sie die Wellenfunktion dieses Zustandes in Kugelkoordinaten an. Benutzen Sie hierbei die Ergebnisse aus der vorherigen Aufgabe. Falls Sie diese Aufgabe noch nicht gemacht haben, verwenden Sie folgendes Resultat

$$\Psi(r, \theta, \phi) = C \left(1 - \frac{2m\omega}{5\hbar} r^2\right) r \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right) Y_1^0(\theta, \phi)$$

und bestimmen Sie eine Normierungskonstante C .

LÖSUNG:

Die Normierungsbedingung liefert:

$$1 = |C|^2 \int_0^\infty r^2 dr r^2 \left(1 - \frac{2m\omega}{5\hbar} r^2\right)^2 \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} r^2\right) = |C|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{5/2} \int_0^\infty \left(1 - \frac{2}{5} x^2\right)^2 x^4 \exp(-x^2) dx$$

Eine Substitution $y := x^2$ führt das angegebene Integral auf eine Summe von Gammafunktionen zurück:

$$\begin{aligned} 1 &= |C|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{5/2} \int_0^\infty \left(1 - \frac{2}{5} y\right)^2 y^2 e^{-y} \frac{dy}{2\sqrt{y}} = \\ &= |C|^2 \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{5/2} \frac{1}{2} \left(\Gamma\left(\frac{5}{2}\right) - \frac{4}{5}\Gamma\left(\frac{7}{2}\right) + \frac{4}{25}\Gamma\left(\frac{9}{2}\right)\right) \\ &= |C|^2 \frac{3\sqrt{\pi}}{20} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{5/2} \end{aligned}$$

Die normierte Wellenfunktion lautet damit:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \sqrt{\frac{20}{3\sqrt{\pi}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{5/4} \left(1 - \frac{2m\omega}{5\hbar} r^2\right) r \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2\right) Y_1^0(\theta, \phi)$$

- Stellen Sie Wellenfunktion als Überlagerung von Produktwellenfunktionen $\Psi(x, y, z) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)$ dar, wobei $\psi_m(x)$ die Wellenfunktion des eindimensionalen harmonischen Oszillator ist. Überlegen Sie sich zuerst, welche Produktwellenfunktionen überhaupt beitragen können. Versuchen Sie dann eine Entwicklung nach diesen durchzuführen.

Hinweis zum Weiterrechnen:

$$|n = 2, l = 1, m = 0\rangle = -\sqrt{\frac{3}{5}}|003\rangle - \sqrt{\frac{1}{5}}(|201\rangle + |021\rangle)$$

LÖSUNG:

Der Eigenwert zum Eigenzustand $\Psi(r, \theta, \phi)$ ist $\hbar\omega\left(\frac{3}{2} + 3\right)$. Daher können nur Produktwellenfunktionen mit der gleichen Energie beitragen. Diese Bedingung drückt sich so aus, dass für die Produktwellenfunktionen $n_1 + n_2 + n_3 = 3$ gelten muss. Mögliche Einzelwellenfunktionen sind:

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\ \psi_1(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\ \psi_2(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(2\frac{m\omega}{\hbar} x^2 - 1\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \\ \psi_3(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{3}} \left(2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/2} x^3 - 3\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Kugelflächenfunktion $Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$ und der Identität $z = r \cos \theta$ lautet die zu entwickelnde Wellenfunktion:

$$\begin{aligned}\Psi(r, \theta, \phi) &= \sqrt{5} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(1 - \frac{2m\omega}{5\hbar}(x^2 + y^2 + z^2)\right) z \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2 + y^2 + z^2)\right) \\ &= \sqrt{5}\tilde{z} \left(1 - \frac{2}{5}(\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 + \tilde{z}^2)\right) \Upsilon(\tilde{x})\Upsilon(\tilde{y})\Upsilon(\tilde{z})\end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurden die Abkürzungen $\Upsilon(u) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{1}{2}u^2\right)$ und $\tilde{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$, \tilde{y} und \tilde{z} analog, eingeführt. Mit diesen Abkürzungen lauten die Einzelwellenfunktionen:

$$\begin{aligned}\psi_0(\tilde{x}) &= \Upsilon(\tilde{x}) \\ \psi_1(\tilde{x}) &= \sqrt{2}\tilde{x}\Upsilon(\tilde{x}) \\ \psi_2(\tilde{x}) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(2\tilde{x}^2 - 1)\Upsilon(\tilde{x}) \\ \psi_3(\tilde{x}) &= \frac{1}{\sqrt{3}}(2\tilde{x}^3 - 3\tilde{x})\Upsilon(\tilde{x})\end{aligned}$$

Der einzige Term in dritter Potenz ist, der mit \tilde{z} . Dieser muss von der Produktwellenfunktion $\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_3(z)$ stammen. Es folgt damit:

$$\sqrt{\frac{1}{5}}\Psi(r, \theta, \phi) + \frac{\sqrt{3}}{5}\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_3(z) = -\frac{2}{5}(1 - \tilde{x}^2 - \tilde{y}^2)\tilde{z}\Upsilon(\tilde{x})\Upsilon(\tilde{y})\Upsilon(\tilde{z})$$

Der übriggebliebene Term muss als Faktor $\psi_1(\tilde{z})$ enthalten. Somit gilt:

$$\begin{aligned}-\frac{2}{5}(1 - \tilde{x}^2 - \tilde{y}^2)\tilde{z}\Upsilon(\tilde{x})\Upsilon(\tilde{y})\Upsilon(\tilde{z}) &= -\frac{1}{5\sqrt{2}}(2 - 2\tilde{x}^2 - 2\tilde{y}^2)\Upsilon(\tilde{x})\Upsilon(\tilde{y})\psi_1(\tilde{z}) \\ &= -\frac{1}{5}(\psi_2(x)\psi_0(y) + \psi_0(x)\psi_2(y))\psi_1(z)\end{aligned}$$

Zusammengefasst ist die Entwicklung des Zustandes $n = 2, l = 1, m = 0$ somit gegeben durch:

$$|n = 2, l = 1, m = 0\rangle = -\sqrt{\frac{3}{5}}|003\rangle - \sqrt{\frac{1}{5}}(|201\rangle + |021\rangle)$$

- Berechnen Sie die Varianz des Impulses in z -Richtung und der z -Koordinate in diesem Zustand. Verifizieren Sie explizit die Heisenbergsche Unschärferelation anhand dieses Beispiels. *Hinweis: Die Varianz $\langle x^2 \rangle_C$ einer Größe x ist definiert als: $\langle x^2 \rangle_C = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$.*

LÖSUNG:

Die Operatoren der z -Koordinate und des z -Impulses p_z ist, ausgedrückt durch Erzeuger und Vernichter:

$$\begin{aligned}z &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_z^\dagger + a_z) \\ p_z &= i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a_z^\dagger - a_z)\end{aligned}$$

Somit kann der Erwartungswert der z -Koordinate einfach berechnet werden:

$$\begin{aligned}\langle z \rangle &= \left(\sqrt{\frac{3}{5}}\langle 003| + \sqrt{\frac{1}{5}}\langle 201| + \sqrt{\frac{1}{5}}\langle 021|\right) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_z^\dagger + a_z) \left(\sqrt{\frac{3}{5}}|003\rangle + \sqrt{\frac{1}{5}}|201\rangle + \sqrt{\frac{1}{5}}|021\rangle\right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\frac{3}{5}\langle 003|(a_z^\dagger + a_z)|003\rangle + \frac{1}{5}\langle 201|(a_z^\dagger + a_z)|201\rangle + \frac{1}{5}\langle 021|(a_z^\dagger + a_z)|021\rangle\right) = 0\end{aligned}$$

Analog folgt $\langle p_z \rangle = 0$. Genauso berechnet man den Erwartungswert des Ortsquadrates und des Impulsquadrates:

$$\begin{aligned}
\langle z^2 \rangle &= \left(\sqrt{\frac{3}{5}} \langle 003 | + \sqrt{\frac{1}{5}} \langle 201 | + \sqrt{\frac{1}{5}} \langle 021 | \right) \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_z^\dagger + a_z) \right)^2 \left(\sqrt{\frac{3}{5}} |003\rangle + \sqrt{\frac{1}{5}} |201\rangle + \sqrt{\frac{1}{5}} |021\rangle \right) \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\frac{3}{5} \langle 003 | (a_z^\dagger + a_z)^2 |003\rangle + \frac{1}{5} \langle 201 | (a_z^\dagger + a_z)^2 |201\rangle + \frac{1}{5} \langle 021 | (a_z^\dagger + a_z)^2 |021\rangle \right) \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\frac{3}{5} \langle 003 | a_z^\dagger a_z + a_z a_z^\dagger |003\rangle + \frac{1}{5} \langle 201 | a_z^\dagger a_z + a_z a_z^\dagger |201\rangle + \frac{1}{5} \langle 021 | a_z^\dagger a_z + a_z a_z^\dagger |021\rangle \right) \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega} \left(\frac{3}{5} (2 \cdot 3 + 1) + \frac{1}{5} (2 \cdot 1 + 1) + \frac{1}{5} (2 \cdot 1 + 1) \right) = \frac{27\hbar}{10m\omega}
\end{aligned}$$

Analog folgt für das Impulsquadrat:

$$\begin{aligned}
\langle p_z^2 \rangle &= \left(\sqrt{\frac{3}{5}} \langle 003 | + \sqrt{\frac{1}{5}} \langle 201 | + \sqrt{\frac{1}{5}} \langle 021 | \right) \left(i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (a_z^\dagger + a_z) \right)^2 \left(\sqrt{\frac{3}{5}} |003\rangle + \sqrt{\frac{1}{5}} |201\rangle + \sqrt{\frac{1}{5}} |021\rangle \right) \\
&= -\frac{m\omega\hbar}{2} \left(\frac{3}{5} \langle 003 | (a_z^\dagger - a_z)^2 |003\rangle + \frac{1}{5} \langle 201 | (a_z^\dagger - a_z)^2 |201\rangle + \frac{1}{5} \langle 021 | (a_z^\dagger - a_z)^2 |021\rangle \right) \\
&= \frac{m\omega\hbar}{2} \left(\frac{3}{5} \langle 003 | a_z^\dagger a_z + a_z a_z^\dagger |003\rangle + \frac{1}{5} \langle 201 | a_z^\dagger a_z + a_z a_z^\dagger |201\rangle + \frac{1}{5} \langle 021 | a_z^\dagger a_z + a_z a_z^\dagger |021\rangle \right) \\
&= \frac{\hbar m \omega}{2} \left(\frac{3}{5} (2 \cdot 3 + 1) + \frac{1}{5} (2 \cdot 1 + 1) + \frac{1}{5} (2 \cdot 1 + 1) \right) = \frac{27\hbar m \omega}{10}
\end{aligned}$$

Die Varianzen sind folglich:

$$\begin{aligned}
\langle z^2 \rangle_C &= \frac{27\hbar}{10m\omega} \\
\langle p_z^2 \rangle_C &= \frac{27m\omega\hbar}{10}
\end{aligned}$$

Einsetzen in die Unschärferelation liefert:

$$\langle z^2 \rangle_C \langle p_z^2 \rangle_C = \left(\frac{27}{10} \right)^2 \hbar^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

- Benutzen Sie die Relation $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ um die Komponenten des Drehimpulsoperators durch Erzeuger und Vernichtoperatoren des dreidimensionalen harmonischen Oszillators dar. Wie lautet der Operator des Drehimpulses \vec{L}^2 in dieser Darstellung?

LÖSUNG:

Das Ergebnis erhält man durch simples Einsetzen der Darstellung der Impuls- und Ortskomponenten durch Erzeuger und Vernichter. Die z -Komponente des Drehimpulses berechnet sich also zu:

$$\begin{aligned}
L_z &= xp_y - yp_x \\
&= i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} ((a_x^\dagger + a_x)(a_y^\dagger - a_y) - (a_x^\dagger - a_x)(a_y^\dagger + a_y)) \\
&= i \frac{\hbar}{2} (a_x^\dagger a_y^\dagger + a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y - a_x a_y - a_x^\dagger a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y + a_x a_y^\dagger + a_x a_y) \\
&= i\hbar(a_x a_y^\dagger - a_y a_x^\dagger)
\end{aligned}$$

Beachten Sie, dass die Erzeuger und Vernichter zu unterschiedlichen Koordinaten kommutieren. Die restlichen Komponenten erhält man durch zyklisches Vertauschen der Indizes:

$$\begin{aligned}
L_x &= i\hbar(a_y a_z^\dagger - a_z a_y^\dagger) \\
L_y &= i\hbar(a_z a_x^\dagger - a_x a_z^\dagger)
\end{aligned}$$

Analog erhält man durch Einsetzen den Drehimpulsquadratoperator:

$$\vec{L}^2 = \hbar^2 \left((n_x + n_y + n_z)(n_x + n_y + n_z + 2) - \vec{a}^2 \cdot (\vec{a}^\dagger)^2 \right)$$

Hierbei sind n_i die Anzahloperatoren $n_i = a_i a_i^\dagger$. Ferner ist \vec{a} ein Vektor aus den Vernichtungsoperatoren a_x, a_y und a_z .

- Benutzen Sie die Darstellung der Drehimpulsoperatoren durch Erzeuger und Vernichter, um die Darstellung der Zustände $|n = 2, l = 1, m = \pm 1\rangle$ aus der Darstellung des Zustand $|n = 2, l = 1, m = 0\rangle$ durch Erzeuger und Vernichter zu gewinnen.

LÖSUNG:

Aus der Darstellung folgt für die Leiteroperatoren L_\pm :

$$\begin{aligned} L_+ &= i\hbar(a_y a_z^\dagger - a_z a_y^\dagger + i a_z a_x^\dagger - i a_x a_z^\dagger) \\ L_- &= i\hbar(a_y a_z^\dagger - a_z a_y^\dagger - i a_z a_x^\dagger + i a_x a_z^\dagger) \end{aligned}$$

Nach Vorlesung ergeben sich nun die Zustände mit $m = \pm 1$ folgendermaßen:

$$|n = 2, l = 1, m = \pm 1\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{2}} L_\pm |n = 2, l = 1, m = 0\rangle$$

Unter Benutzung der Entwicklung von $|n = 2, l = 1, m = 0\rangle$ in Produktzustände findet man folgende Ergebnisse:

$$\begin{aligned} |n = 2, l = 1, m = \pm 1\rangle &= \frac{-i}{\sqrt{2}}(a_y a_z^\dagger - a_z a_y^\dagger \pm i a_z a_x^\dagger \mp i a_x a_z^\dagger) \left(\sqrt{\frac{3}{5}}|003\rangle + \sqrt{\frac{1}{5}}(|201\rangle + |021\rangle) \right) \\ &= \frac{-i}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{5}} \left(-\sqrt{3}|012\rangle \pm i\sqrt{3}|102\rangle \right) + \\ &+ \frac{-i}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{1}{5}} \left(-|210\rangle \pm i\sqrt{3}|300\rangle \mp 2i|102\rangle \right) + \\ &+ \frac{-i}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{1}{5}} \left(2|012\rangle - \sqrt{3}|030\rangle \pm i|120\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{10}} \left(i|012\rangle \pm |102\rangle + i|210\rangle \pm |120\rangle \pm \sqrt{3}|300\rangle + i\sqrt{3}|030\rangle \right) \\ &= \pm \frac{1}{\sqrt{10}} \left(|102\rangle \pm i|012\rangle + |120\rangle \pm i|210\rangle + \sqrt{3}(|300\rangle \pm i|030\rangle) \right) \end{aligned}$$

- In den Zuständen $|300\rangle, |030\rangle$ und $|003\rangle$ sind mehrere Drehimpulse vorhanden. Welche Konfigurationen (n, l) enthalten einen dieser Zustände? Wie sieht es für die Zustände $|700\rangle, |070\rangle$ und $|007\rangle$ aus?

LÖSUNG:

Alle Konfigurationen mit $2(n-1)+l = 3$ können einen dieser 3-Zustände enthalten. Diese Gleichung ist äquivalent zu $2n + l = 5$. Somit sind diese Zustände in den Konfigurationen $(1, 3)$ und $(2, 1)$ enthalten. Die Zustände tragen somit zu einem Septett $l = 3$ und einem Triplett $l = 1$ bei.

Analog muss für die 7-Zustände gelten $2n + l = 9$. Dies führt auf die möglichen Konfigurationen $(1, 7), (2, 5), (3, 3)$ und $(4, 1)$.

3.3 Das Wasserstoffatom (**)

- Bei der Behandlung des Wasserstoffatoms wurden in der Vorlesung Schwerpunktskoordinaten eingeführt:

$$\begin{aligned}\vec{R} &:= \frac{m_p \vec{r}_p + m_e \vec{r}_e}{m_p + m_e} \\ \vec{r} &:= \vec{r}_e - \vec{r}_p\end{aligned}$$

Zeigen Sie, dass die Operatoren \vec{r} , \vec{p} , \vec{R} und \vec{P} die kanonischen Vertauschungsrelationen für Orts- und Impulsoperatoren erfüllen.

LÖSUNG:

Da die Ortsoperatoren untereinander kommutieren, kommutiert auch jedes Paar der Schwerpunktskoordinatenoperatoren. Analoges gilt für die Impulsoperatoren. Diese lauten:

$$\begin{aligned}\vec{P} &:= \vec{p}_e + \vec{p}_p \\ \vec{p} &:= \frac{m_p \vec{p}_e - m_e \vec{p}_p}{m_p + m_e}\end{aligned}$$

Somit lauten die nicht trivialen Kommutatorrelationen:

$$\begin{aligned}[R_i, P_j] &= \left[\frac{m_p r_{p,i} + m_e r_{e,i}}{m_e + m_p}, p_{e,j} + p_{p,j} \right] = \frac{m_p}{m_e + m_p} [r_{p,i}, p_{p,j}] + \frac{m_e}{m_e + m_p} [r_{e,i}, p_{e,j}] = \delta_{ij} i\hbar \\ [r_i, p_j] &= \left[r_{e,i} - r_{p,i}, \frac{m_p p_{e,j} - m_e p_{p,j}}{m_p + m_e} \right] = \frac{m_p}{m_p + m_e} [r_{e,i}, p_{e,j}] + \frac{m_e}{m_p + m_e} [r_{p,i}, p_{p,j}] \\ &= -\left(\frac{m_p}{m_p + m_e} + \frac{m_e}{m_p + m_e} \right) \delta_{ij} i\hbar = i\delta_{ij} \hbar \\ [R_i, p_j] &= \left[\frac{m_e r_{e,i} + m_p r_{p,i}}{m_e + m_p}, \frac{m_p p_{e,j} - m_e p_{p,j}}{m_p + m_e} \right] = \frac{m_e}{m_e + m_p} \frac{m_p}{m_p + m_e} [r_{e,i}, p_{e,j}] + \\ &+ \frac{m_p}{m_e + m_p} \frac{-m_e}{m_e + m_p} [r_{p,i}, p_{p,j}] = 0 \\ [r_i, P_j] &= [r_{e,i} - r_{p,i}, p_{e,j} + p_{p,j}] = [r_{e,i}, p_{e,j}] - [r_{p,i}, p_{p,j}] = 0\end{aligned}$$

- Betrachten Sie nun das Wasserstoffatom in einem Streuzustand $E > 0$. Diese Zustände sind i. A. nicht normierbar. Welcher Ansatz ist in diesem Fall für den Radialanteil der Wellenfunktion der Relativbewegung sinnvoll?

LÖSUNG:

In einem ungebundenen Zustand mit $E > 0$ führt die asymptotische Differentialgleichung für $r \rightarrow \infty$ analog zur Vorlesung auf den Teilansatz $v_\infty(r) = e^{-ikr}$. Hierbei erfüllt k die Beziehung:

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

In der asymptotischen Differentialgleichung für $r \rightarrow 0$ ändert sich nichts, da auch in diesem Fall die Wellenfunktion für $r \rightarrow 0$ beschränkt bleiben muss.

Der Ansatz lautet nun:

$$u(r) = f(r)r^{l+1}e^{-ikr}$$

- Verwenden Sie nun den Ansatz $u(r) = f(r)r^{l+1}e^{-ikr}$ mit $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$. Nehmen Sie an, dass $f(r)$ in eine Potenzreihe entwickelbar ist. Wie lautet die Rekursionsformel für die Koeffizienten a_n ?

LÖSUNG:

Formal kann die Formel aus der Vorlesung mit der Ersetzung $\kappa \rightarrow ik$ gewonnen werden:

$$a_{n+1} = a_n \frac{2ikn - \frac{\mu e^2}{2\pi\hbar^2\epsilon_0} + 2ik(l+1)}{n(n+1) + 2(n+1)(l+1)}$$

- Ist es möglich, dass $f(r)$ ein Polynom ist? Was folgt daraus für das Spektrum im Fall $E > 0$?

LÖSUNG:

Ist $f(r)$ ein Polynom vom Grade n , so muss $a_{n+1} = 0$ und $a_n \neq 0$ sein. Mit der Rekursionsformel findet man dann als Bedingung:

$$2ik(n+l+1) = \frac{\mu e^2}{2\pi\hbar^2\epsilon_0}$$

Die rechte Seite dieser Gleichung ist stets reell, sodass k rein imaginär sein muss. Wegen $E > 0$ ist k aber reell, sodass die Rekursion nicht abbrechen kann. Somit ist an k keine Bedingung geknüpft und das Spektrum ist kontinuierlich.

- Ein Wasserstoffatom befinde sich im Zustand

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|n=1, l=0, m=0\rangle - i\frac{1}{\sqrt{2}}|n=2, l=1, m=1\rangle.$$

In welchem Zustand $|\Psi'\rangle$ befindet sich das System nach einer Drehung um $\pi/6$ um die z -Achse? Können durch Drehung Zustände mit verschiedenem l gemischt werden? Warum?

LÖSUNG:

Der unitäre Operator, der die Drehung um $\pi/6$ bewirkt, ist laut Vorlesung gegeben durch:

$$U(\pi/6) = \exp\left(-i\frac{\pi L_z}{6\hbar}\right)$$

Nun ist $|\Psi\rangle$ in Eigenzuständen von L_z zerlegt, sodass daher folgt:

$$\begin{aligned} |\Psi'\rangle &= U(R)|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-i\frac{\pi L_z}{6\hbar}\right) |n=1, l=0, m=0\rangle - i\frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-i\frac{\pi L_z}{6\hbar}\right) |n=2, l=1, m=1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-i\frac{\pi \cdot 0}{6\hbar}\right) |n=1, l=0, m=0\rangle - i\frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-i\frac{\pi \cdot \hbar}{6\hbar}\right) |n=2, l=1, m=1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |n=1, l=0, m=0\rangle - i\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{2} (\sqrt{3} - i) |n=2, l=1, m=1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |n=1, l=0, m=0\rangle - \frac{1}{\sqrt{8}} (1 - i\sqrt{3}) |n=2, l=1, m=1\rangle \end{aligned}$$

Da $\hbar^2 l(l+1)$ Eigenwert von L^2 ist und dieser mit allen Komponenten L_i des Drehimpulsoperators kommutiert, kommutiert L^2 auch mit allen unitären Operatoren, die Drehungen darstellen. Folglich können durch Drehungen Zustände mit unterschiedlichem l nicht gemischt werden.

3.4 Sphärischer Potentialtopf (**)

Ein nichtrelativistisches Teilchen der Masse m bewege sich in einem radialsymmetrischen Potential der Form

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r > r_0 \\ -V_0 & r < r_0 \end{cases}.$$

Hierbei ist $V_0 > 0$. In dieser Aufgabe sollen die Wellenfunktionen der gebundenen Zustände $-V_0 < E < 0$ gesucht werden.

- Stellen Sie die Schrödingergleichung für die Bereiche $r < r_0$ und $r > r_0$ in Kugelkoordinaten auf. Sie können den Winkelanteil des Laplaceoperators durch den Drehimpuls ausdrücken.

LÖSUNG:

Für $r < r_0$ lautet die Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \Psi(r, \theta, \phi) + \left(\frac{L^2}{2mr^2} - V_0 - E \right) \Psi(r, \theta, \phi) = 0$$

Für $r > r_0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \Psi(r, \theta, \phi) + \left(\frac{L^2}{2mr^2} - E \right) \Psi(r, \theta, \phi) = 0$$

- Aufgrund der Rotationssymmetrie kann man die Wellenfunktion $\Psi(r, \theta, \phi)$ in einen Radialanteil $u(r)$ und einen Winkelanteil $Y(\theta, \phi)$ zerlegen. Wie lautet die Differentialgleichung für $u(r)$, wenn sich das System in einem Eigenzustand von L^2 befindet?

LÖSUNG:

Einsetzen des Ansatzes $\Psi(r, \theta, \phi) = u(r)Y_l^m(\theta, \phi)$ in die Schrödingergleichungen liefert für $r < r_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r u(r) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - V_0 - E \right) u(r) = 0$$

und für $r > r_0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r u(r) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - E \right) u(r) = 0.$$

- Für den Rest der Aufgabe kann $l = 0$ angenommen werden. Bestimmen Sie die Wellenfunktionen dieses Zustandes.

LÖSUNG:

Durch scharfes Hinsehen liest man folgende Lösung ab:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \begin{cases} \frac{Ae^{ikr} + Be^{-ikr}}{r} & r < r_0 \\ \frac{Ce^{\kappa r} + De^{-\kappa r}}{r} & r > r_0 \end{cases}$$

Hierbei gilt $k^2 = 2m(V_0 + E)/\hbar^2$ und $\kappa^2 = -2mE/\hbar^2$.

- Wie lauten die Randbedingungen an die Wellenfunktion?

LÖSUNG:

Es sollen gebundene Zustände betrachtet werden. Daher muss die Wellenfunktion im unendlichen verschwinden. Dies bedeutet, dass $C = 0$ sein muss. Ferner muss die Wellenfunktion im Ursprung endlich bleiben. Daher muss $A + B = 0$ sein. Mit diesen Bedingungen bleibt für die Wellenfunktion noch folgende Form übrig:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \begin{cases} \frac{A \sin kr}{r} & r < r_0 \\ \frac{B e^{-\kappa r}}{r} & r > r_0 \end{cases}$$

Die Wellenfunktion muss ferner bei $r = r_0$ stetig differenzierbar sein, sodass dies die beiden Bedingungen liefert:

$$\begin{aligned} A \frac{\sin kr_0}{r_0} &= B \frac{e^{-\kappa r_0}}{r_0} \\ A \frac{kr_0 \cos kr_0 - \sin kr_0}{r_0^2} &= B \frac{-\kappa r_0 e^{-\kappa r_0} - e^{-\kappa r_0}}{r_0^2} \end{aligned}$$

- Leiten Sie aus den Randbedingungen die Form der Wellengleichung und eine Bedingung, aus der die Energien der Bindung gewonnen werden können, her.

LÖSUNG:

Obiges Gleichungssystem der Randbedingungen besitzt nur dann eine nicht-triviale Lösung, wenn gilt

$$\sin kr_0(1 + \kappa r_0)e^{-\kappa r_0} = e^{-\kappa r_0}(\sin kr_0 - kr_0 \cos kr_0).$$

Einige Umformungen ergeben die Bedingung, aus der die Energie bestimmt werden kann:

$$\tan kr_0 = -\frac{k}{\kappa}$$

Die Wellenfunktion lautet in diesem Fall:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \begin{cases} \frac{A \sin kr}{r} & r < r_0 \\ \frac{A \sin kr_0 e^{-\kappa(r-r_0)}}{r} & r > r_0 \end{cases}$$

- Normieren Sie die Wellenfunktion.

LÖSUNG:

Die Normierungsbedingung lautet hier:

$$\begin{aligned} 1 &= |A|^2 \int_0^{r_0} dr \sin^2 kr + |A|^2 \sin^2 kr_0 \int_{r_0}^{\infty} e^{-\kappa(r-r_0)} dr \\ &= |A|^2 \left(\frac{r_0}{2} - \frac{1}{4k} \sin 2kr_0 + \frac{\sin^2 kr_0}{\kappa} \right) \\ &= |A|^2 \left(\frac{r_0}{2} + \sin kr_0 \cos kr_0 \left(\frac{\tan kr_0}{\kappa} - \frac{1}{2k} \right) \right) \\ &= |A|^2 \left(\frac{r_0}{2} + \frac{\tan kr_0}{1 + \tan^2 kr_0} \left(\frac{\tan kr_0}{\kappa} - \frac{1}{2k} \right) \right) \\ &= |A|^2 \left(\frac{r_0}{2} + \frac{k/\kappa}{1 + k^2/\kappa^2} \left(\frac{k}{\kappa^2} + \frac{1}{2k} \right) \right) \\ &= |A|^2 \left(\frac{r_0}{2} + \frac{2k^2 + \kappa^2}{2\kappa(\kappa^2 + k^2)} \right) \end{aligned}$$

Hierbei wurde die Beziehung $\tan kr_0 = -k/\kappa$ benutzt. Die normierte Wellenfunktion lautet nun:

$$\Psi(r, \theta, \phi) = \sqrt{\frac{2\kappa(\kappa^2 + k^2)}{r_0\kappa(\kappa^2 + k^2) + 2k^2 + \kappa^2}} \begin{cases} \frac{\sin kr}{r} & r < r_0 \\ \frac{\sin kr_0 e^{-\kappa(r-r_0)}}{r} & r > r_0 \end{cases}$$

3.5 Landauzylinder (**)

Gegeben sei ein geladenes, nicht relativistisches, spinloses Teilchen der Masse m in einem homogenen Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$.

- Stellen Sie die Schrödingergleichung für dieses Problem auf. *Beachten Sie, dass der kanonische Impuls in Anwesenheit eines Vektorpotentials gegeben ist durch: $\vec{p}_{can} = \vec{p} - q\vec{A}$.*

Das Vektorpotential eines homogenen Magnetfeld \vec{B} ist beispielsweise durch ein Vektorpotential der Form

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{r} \times \vec{B}$$

gegeben. Verwenden Sie dieses Vektorpotential für Ihre Rechnungen.

LÖSUNG:

Der Hamiltonoperator für dieses Problem lautet:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{q}{2} \vec{r} \times \vec{B} \right)^2 = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{4m} \left(\vec{p} \cdot (\vec{r} \times \vec{B}) + (\vec{r} \times \vec{B}) \cdot \vec{p} \right) + \frac{q^2}{8m} (\vec{r} \times \vec{B})^2 \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{q}{4m} \left(-\vec{L} \cdot \vec{B} - \vec{B} \cdot \vec{L} \right) + \frac{q^2}{8m} (\vec{r}^2 \vec{B}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2) \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{qB}{2m} L_z + \frac{q^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2) \\ &= \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{q^2 B^2}{8m} (x^2 + y^2) + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{qB}{2m} L_z \end{aligned}$$

Die Schrödingergleichung ist dann $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$.

- Nutzen Sie die Translationsinvarianz entlang der z -Achse und die Rotationsinvarianz um die gleiche Achse aus, um die Schrödingergleichung auf die eines zweidimensionalen, harmonischen Oszillators zurückzuführen.

LÖSUNG:

Aufgrund der Translationsinvarianz entlang der z -Achse, kommutiert der Erzeuger dieser Translationen p_z mit dem Hamiltonoperator. Analoges gilt für den Operator L_z aufgrund der Rotationsinvarianz. Wählt man nun einen Zustand, der Eigenzustand von H zum Eigenwert E , von p_z zum Eigenwert $\hbar k_z$ und von L_z zum Eigenwert $l_z \hbar$ ist, so lautet die Schrödingergleichung:

$$\left(\frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{m}{2} \left(\frac{qB}{2m} \right)^2 (x^2 + y^2) \right) |\Psi\rangle = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} - \frac{qB\hbar}{2m} l_z \right) |\Psi\rangle$$

Dies ist exakt die Schrödingergleichung des zweidimensionalen harmonischen Oszillators zur Eigenfrequenz $\omega = qB/2m$.

- Bestimmen Sie die Eigenenergien des Hamiltonoperators. Achten Sie darauf, dass möglicherweise aus Symmetriegründen nicht alle Kombinationen von Quantenzahlen erlaubt sind. Wie groß ist die Entartung eines Energieniveaus, wenn Bewegungen in z -Richtung nicht beachtet werden? Zeigen Sie, dass die Eigenenergien durch die Formel

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega_c \left(\frac{1}{2} + N \right)$$

gegeben sind, wobei $\omega_c = qB/m$ und $N \in \mathbb{N}_0$ ist.

LÖSUNG:

Da das System formal auf einen zweidimensionalen harmonischen Oszillator zurückgeführt werden kann, ist die Gesamtenergie des Elektrons ist somit gegeben als:

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega (1 + n_x + n_y) + \hbar\omega l_z$$

Allerdings können die n_x , n_y und l_z nicht freigewählt werden, da die Wellenfunktion sich unter Drehungen und Spiegelungen konsistent verhalten muss. Ein eindimensionaler harmonischer Oszillator im Zustand mit der Quantenzahl n hat die Parität $(-1)^n$. Daher verhält sich der $x - y$ -Anteil der Gesamtwellenfunktion unter der Transformation $(x, y) \mapsto (-x, -y)$ im Falle $n_x + n_y \in 2\mathbb{Z}$ wie eine gerade, andernfalls wie eine ungerade Funktion. Nun sind aber in zwei Dimensionen eine Spiegelung am Ursprung identisch mit einer Drehung um π . Eine solche Drehung wird von L_z erzeugt und führt zu einer Phase von $e^{-i\pi l_z} = (-1)^{l_z}$. Damit das Ergebnis konsistent ist, müssen daher l_z und $n_x + n_y$ gleichzeitig gerade oder ungerade sein. Folglich lauten die möglichen Gesamtenergien des Systems:

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega (1 + 2N)$$

Liegt keine Bewegung in z -Richtung vor, so ist $k_z = 0$ und die Entartung eines Energieniveaus ist durch Anzahl der Kombinationen von n_x , n_y und l_z gegeben, für die $n_x + n_y + l_z = 2N$ ist.

Die Entartung ist somit folgendermaßen zu berechnen:

$$g(N) = \sum_{n_x=0}^{2N} \sum_{n_y=0}^{2N-n_x} 1 = \sum_{n_x=0}^{2N} 2N - n_x + 1 = (2N + 1)^2 - \frac{1}{2} 2N(2N + 1) = (2N + 1)(N + 1)$$

In obiger Definition ist $\omega/2 = qB/m = \omega_c$ die Zyklotronfrequenz eines geladenen Teilchens im Magnetfeld. Ausgedrückt durch diese Frequenz erhält man die bekannte Formel für die Energie der Landauzyklinder:

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \hbar\omega_c \left(\frac{1}{2} + N \right)$$