

Ferienkurs *Quantenmechanik* – Sommer 2009

Quantenmechanik in drei Dimensionen, Drehimpuls und Spin

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.

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

- 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.

- 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 $|\vec{p}, i\rangle$ geschrieben 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?

- 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:

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

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.
- 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 $l = 1$.
- 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?
- 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 $l = 1$ -Tripletts um die x -Achse um den Winkel ϕ darstellt.

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:

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

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

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.
- 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.

- Berechnen Sie den Erwartungswert $\langle \Psi(t) | \vec{\mu} | \Psi(t) \rangle$ des magnetischen Moments. Sie können hierfür das Magnetfeld in z -Richtung legen.
- Überlegen Sie sich, wie man eine formale Lösung der Schrödingergleichung für den Fall eines zeitlich variierenden magnetischen Feldes finden kann. Berechnen Sie für eine 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.

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:

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

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

- Stellen Sie die Schrödingergleichung für dieses Problem auf.
- Begründen Sie, warum dieses Problem durch Aufspaltung des Zustandes in einen Radialanteil $|r\rangle$ und einen Winkelanteil $|\theta, \phi\rangle$ vereinfacht werden kann.
- 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.
- 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.*
- Verwenden Sie den Ansatz und finden Sie eine Differentialgleichung für die unbestimmte Funktion Ihres Ansatzes. *Hinweis: Ein möglicher Ansatz ist*

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

- 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.

- 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?

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?
- 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.

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 .

- 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 Oszillators ist. Überlegen Sie sich zuerst, welche Produktwellenfunktionen überhaupt beitragen können. Versuchen Sie dann eine Entwicklung nach diesen durchzuführen.

Hinweis zum Weiterrechnen:

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

- 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: $\langle x^2 \rangle_C = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$.*
- 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?
- 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.
- 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?

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.

- 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?
- 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 ?

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

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.
- 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?
- Für den Rest der Aufgabe kann $l = 0$ angenommen werden. Bestimmen Sie die Wellenfunktionen dieses Zustandes.
- Wie lauten die Randbedingungen an die Wellenfunktion?
- Leiten Sie aus den Randbedingungen die Form der Wellengleichung und eine Bedingung, aus der die Energien der Bindung gewonnen werden können, her.
- Normieren Sie die Wellenfunktion.

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.

- 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.

- 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.