Matthias Herzog Blatt 3

# Ferienkurs Quantenmechanik

Drehimpulse und dreidimensionale Probleme

## 1 Kurze Fragen

*a*) Geben Sie den Wert folgender Ausdrücke an:

$\varepsilon_{123}$, $\varepsilon_{313}$, $\varepsilon_{321}$, $\varepsilon_{213}$, $\varepsilon_{113}$, $\varepsilon_{312}$, $\varepsilon_{222}$

*Lösung:*

1,0,-1,-1,0,1,0

*b*) Zeigen Sie:

$$[A,BC] = [A,B]C + B[A,C] \tag{1}$$

*Lösung:*

$$\begin{aligned} [A,BC] &= ABC - BAC + BAC - BCA & (2)\\ &= ABC - BCA & (3)\\ &= [A,BC] & (4) \end{aligned}$$

*c*) Zeigen Sie, dass für einen dreidimensionalen Drehimpuls $\left[J_i, J^2\right]$ aus der Definition $[J_i, J_j] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}J_k$ folgt.

*Lösung:*

$$\begin{aligned} \left[J_i, J^2\right] &= \left[J_i, J_i^2 + J_j^2 + J_k^2\right] & (5)\\ &= \left[J_i, J_i^2\right] + \left[J_i, J_j^2\right] + \left[J_i, J_k^2\right] & (6)\\ &= [J_i, J_i]\, J_i + J_i\,[J_i, J_i] + [J_i, J_j]\, J_j + J_j\,[J_i, J_j] + [J_i, J_k]\, J_k + J_k\,[J_i, J_k] & (7)\\ &= 0 + 0 + \mathrm{i}\hbar J_k J_j + J_j \mathrm{i}\hbar J_k - J_j \mathrm{i}\hbar J_k - \mathrm{i}\hbar J_k J_j & (8)\\ &= 0 & (9) \end{aligned}$$

*d*) Zeigen Sie, dass wenn zwei Komponenten eines Drehimpulses mit einem Operator vertauschen, auch die dritte Komponente des Drehimpuls mit diesem Operator vertauscht.

*Lösung:*

$$\begin{aligned} [J_x, A] &= 0 & (10)\\ [J_y, A] &= 0 & (11)\\ \Rightarrow [[J_x, J_y], A] &= [J_x J_y - J_y J_x, A] \quad = \quad 0 & (12)\\ [[J_x, J_y], A] &= [\mathrm{i}\hbar J_z, A] & (13)\\ \Rightarrow [J_z, A] &= 0 & (14) \end{aligned}$$

*e*) Welche Eigenwerte haben die drei Pauli-Matrizen?

*Lösung:*

z.B. $\hat{\sigma}_y$

$$\begin{vmatrix} 0-\lambda & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0 \tag{15}$$

$$\Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm 1 \tag{16}$$

$\hat{\sigma}_x$ und $\hat{\sigma}_z$ haben die selben Eigenwerte.

*f*) Woraus folgt die Ganzzahligkeit der Drehimpulsquantenzahlen beim Wasserstoff?

*Lösung:*

In Kugelkoordinaten ist die Anhängigkeit von $\varphi$ proportional zu $\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$. Die Ortswellenfunktion muss bei Drehung um $2\pi$ wieder in sich selbst übergehen. Daher ist $m$ ganzzahlig, und damit auch $l$.

## 2 Spin-1-Algebra

Statt eines Spin-1/2-Teilchens wie in der Vorlesung betrachten wir jetzt ein Spin-1-Teilchen mit $s = 1$.

*a*) Welche Werte kann jetzt die zweite Quantenzahl $m_s$?

*Lösung:* -1,0,1

*b*) Schreiben Sie die drei möglichen Eigenzustände in der Diracschen Bra-Ket-Notation.

*Lösung:*

$$|1,1\rangle \ , \ |1,0\rangle \ , \ |1,-1\rangle \tag{17}$$

*c*) Stellen Sie die drei Zustände durch drei Spaltenvektoren (*Spinoren*) $\chi(+)$, $\chi(0)$ und $\chi(-)$ dar.

*Lösung:*

$$\chi(+) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{18}$$

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{19}$$

$$\chi(-) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{20}$$

*d*) Wenden Sie die Operatoren $\hat{S}^2$ und $\hat{S}_z$ auf die drei oben beschriebenen Zustände $\chi$ an.

*Lösung:*

$$\hat{S}^2\chi(+) = 2\hbar^2\chi(+) \tag{21}$$

$$\hat{S}^2\chi(0) = 2\hbar^2\chi(0) \tag{22}$$

$$\hat{S}^2\chi(-) = 2\hbar^2\chi(-) \tag{23}$$

$$\hat{S}_z\chi(+) = \hbar\chi(+) \tag{24}$$

$$\hat{S}_z\chi(0) = 0 \tag{25}$$

$$\hat{S}_z\chi(-) = -\hbar\chi(-) \tag{26}$$

*e*) Benutzen Sie diese Ergebnisse, um $\hat{S}^2$ und $\hat{S}_z$ in Matrixschreibweise zu schreiben.

*Lösung*

$$
\begin{aligned}
\hat{S}^2 &= 2\hbar^2 \mathbb{1} && (27)\\
\hat{S}_z &= \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} && (28)
\end{aligned}
$$

*f*) Wenden sie den Auf- und Absteigeoperator auf die drei Eigenzustände an.

*Lösung*

$$
\begin{aligned}
\hat{S}_+ \chi(+) &= 0 && (29)\\
\hat{S}_+ \chi(0) &= \sqrt{2}\hbar \chi(+) && (30)\\
\hat{S}_+ \chi(-) &= \sqrt{2}\hbar \chi(0) && (31)\\
\hat{S}_- \chi(+) &= \sqrt{2}\hbar \chi(0) && (32)\\
\hat{S}_- \chi(0) &= \sqrt{2}\hbar \chi(-) && (33)\\
\hat{S}_- \chi(-) &= 0 && (34)
\end{aligned}
$$

*g*) Bestimmen Sie daraus $\hat{S}_+$ und $\hat{S}_-$ in Matrixschreibweise.

*Lösung*

$$
\begin{aligned}
\hat{S}_+ &= \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} && (35)\\
\hat{S}_- &= \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} && (36)
\end{aligned}
$$

*h*) Bestimmen Sie schließlich auch noch $\hat{S}_x$ und $\hat{S}_y$ in Matrixschreibweise.

*Lösung*

$$
\begin{aligned}
\hat{S}_x &= \frac{1}{2}\left(\hat{S}_+ + \hat{S}_-\right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} && (37)\\
\hat{S}_y &= \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(\hat{S}_+ - \hat{S}_-\right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} && (38)
\end{aligned}
$$

# 3 Starrer Rotator im Magnetfeld

Der Hamiltonoperator eines starren Rotators in einem Magnetfeld ist

$$
\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2\Theta} + \gamma \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{L}} \qquad (39)
$$

mit dem Bahndrehimpulsoperator $\hat{\mathbf{L}}$ und den beiden Konstanten Trägheitsmoment $\Theta$ und gyromagnetisches Verhältnis $\gamma$.

*a*) Der Rotator befindet sich zuerst in einem konstanten Magnetfeld in $z$-Richtung:

$$\mathbf{B}_a = B\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{40}$$

*b*) Dann befindet sich der Rotator in einem konstanten Magnetfeld der folgenden Form:

$$\mathbf{B}_b = B\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{41}$$

Geben Sie für beide Fälle die möglichen Energieeigenwerte des Systems an.

*Lösung* 1.Fall:

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2\Theta} + \gamma B \hat{L}_z \tag{42}$$

Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}$ sind gemeinsame Eigenbasis von $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$:

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2 Y_{lm} &= \hbar^2 l(l+1) Y_{lm} \quad \text{mit } l \geq 0 & (43)\\
\hat{L}_z Y_{lm} &= \hbar m Y_{lm} \quad \text{mit } -l \leq m \leq l & (44)\\
\Rightarrow E_{lm} &= \left\langle Y_{lm} \middle| \hat{H} | Y_{lm} \right\rangle & (45)\\
&= \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\Theta} + \gamma B \hbar m & (46)
\end{aligned}$$

2. Fall:

Man kann das Koordinatensystem so drehen, dass das Magnetfeld wieder in $z$-Richtung zeigt. Diese Koordinatentransformation lässt $\hat{L}^2$ invariant. Um den Betrag korrekt zu erhalten, muss man vorher $\mathbf{B}_b$ normieren:

$$\mathbf{B}_b = \sqrt{2}B\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}\right) \tag{47}$$

Mit dem Ergebnis der ersten Teilaufgabe folgt dann daraus sofort

$$E_{lm} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\Theta} + \sqrt{2}\gamma B \hbar m \tag{48}$$

# 4 Dreidimensionaler harmonischer Oszillator

Der Hamiltonoperator des dreidimensionalen isotropen harmonischen Oszillators lautet in der Ortsdarstellung

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 |\mathbf{x}|^2 \tag{49}$$

mit der Masse $m$.

*a*) Schreiben Sie die zeitunabhängige Schrödingergleichung des Systems in Kugelkoordinaten. Machen Sie dazu den üblichen Ansatz für die Wellenfunktion $\Psi$:

$$\Psi(r,\theta,\varphi) = \frac{u_l(r)}{r} Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{50}$$

Warum ist dieser Separationsansatz gerechtfertigt?

*Lösung* Potential nur vom Abstand abhängig. $Y_{lm}$ sind Kugelfunktionen, Schrödingergleichung wird dann zu (siehe Vorlesung):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{\hbar^2 l\,(l+1)}{2mr^2}+\frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right)u_l\,(r) \quad = \quad E u_l\,(r) \tag{51}$$

*b*) Setzt man jetzt, analog zum Wasserstoffatom in der Vorlesung,

$$u_l\,(r) \quad = \quad r^{l+1} v_l\,(\rho)\,\mathrm{e}^{-\rho/2} \tag{52}$$

$$\text{mit} \qquad \rho \quad = \quad \frac{m\omega}{\hbar} r^2 \tag{53}$$

ist die Schrödingergleichung (51) äquivalent zu der *laguerrschen Differentialgleichung*

$$\left(\rho\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\left(l+\frac{3}{2}-\rho\right)\frac{\partial}{\partial\rho}+n\right)v_l\,(\rho) \quad = \quad 0 \tag{54}$$

Wer Lust dazu hat, kann das nachrechnen und den Parameter $n$ bestimmen. Das korrekte Ergebnis lautet

$$n \quad = \quad \frac{1}{2}\left(\frac{E}{\hbar\omega}-l-\frac{3}{2}\right) \tag{55}$$

Machen Sie nun einen Potenzreihenansatz

$$v_l\,(\rho) \quad = \quad \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^j \tag{56}$$

und geben Sie eine Rekursionsformel für die Koeffizienten $a_j$ an.

*Lösung*

$$0 \quad = \quad \left(\rho\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\left(l+\frac{3}{2}-\rho\right)\frac{\partial}{\partial\rho}+n\right)\sum_{j=0}^{\infty} a_j\rho^j \tag{57}$$

$$= \quad \sum_{j=0}^{\infty}\rho a_j \rho^{j-2} j(j-1)+\sum_{j=0}^{\infty}\left(l+\frac{3}{2}-\rho\right)a_j\rho^{j-1}j+\sum_{j=0}^{\infty} n a_j \rho^k \tag{58}$$

$$= \quad \sum_{j=0}^{\infty}\left(j(j+1)a_{j+1}+(j+1)\left(l+\frac{3}{2}\right)a_{j+1}-ja_j+na_j\right)\rho^j \tag{59}$$

$$\Rightarrow a_{j+1} \quad = \quad \frac{j-n}{(j+1)\left(j+l+\frac{3}{2}\right)} \tag{60}$$

*c*) Warum muss diese Reihe abbrechen? Geben Sie die Abbruchbedingung an und bestimmen Sie daraus die Quantisierungsvorschrift für die Energie des Oszillators.

*Lösung*

Abbruch damit $u_l$ im unendlichen verschwindet

Damit die Rekursion nach endlich vielen Termen abbricht, muss $n$ eine natürliche Zahl sein. Das ist die Quantisierungsbedingung. Aus (55), der Definition von $n$, folgt damit für die Energieniveaus des sphärischen harmonischen Oszillators:

$$E_{n,l} \quad = \quad \hbar\omega\left(2n+l+\frac{3}{2}\right), \qquad n,l\in\mathbb{N} \tag{61}$$

*d*) Berechnen Sie die Entartung der Energieniveaus: Setzen Sie $N=2n+l$ und überlegen Sie, wie hoch die Anzahl der Zustände zur Energie $E_N=\hbar\omega\left(N+\frac{3}{2}\right)$ ist. Es reicht, wenn Sie die Rechnung für gerade $N$ durchführen.

*Lösung*

Für gegebenes $n$ und $l$ ist $l = N - 2n$ und es gibt $c_l = 2l + 1$ mögliche Werte der Magnetquantenzahl $m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l$. Wir nehmen zuerst an, dass $N$ gerade ist. Die Anzahl der Zustände zur Energie $E_N = \hbar\omega\left(N + \frac{3}{2}\right)$ ist dann

$$
\begin{aligned}
g_N &= \sum_{n=0}^{N/2} c_{(N-2n)} && (62)\\
&= \sum_{n=0}^{N/2} \left(2\left(N-2n\right)+1\right) && (63)\\
&= \sum_{n=0}^{N/2} \left(2N+1\right) - 4\sum_{n=0}^{N/2} n && (64)\\
&= \left(2N+1\right)\left(N/2+1\right) - 2\left(N/2+1\right)N/2 && (65)\\
&= \left(N/2+1\right)\left(N+1\right) && (66)\\
&= \frac{\left(N+1\right)\left(N+2\right)}{2}. && (67)
\end{aligned}
$$

Für ungerade $N$ verläuft die Rechnung analog.