Ferienkurs Quantenmechanik - Aufgaben

Sommersemester 2013

Daniel Rosenblüh und Florian Häse
Fakultät für Physik
Technische Universität München

12. September 2013

Drehimpuls
und
Spin

Drehimpuls

Aufgabe 1 **(*)** *Beweise die Relationen*

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z, \quad [L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm, \quad [L^2, L_\pm] = 0$$

mithilfe von den Vertauschungsrelationen für den Drehimpuls: $[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$

Lösung:

$$\begin{aligned}
[L_+, L_-] &= [L_x + iL_y, L_x - iL_y] = \underbrace{[L_x, L_x]}_{=0} + i\underbrace{[L_y, L_x]}_{=-i\hbar L_z} - i\underbrace{[L_x, L_y]}_{=i\hbar L_z} + \underbrace{[L_y, L_y]}_{=0} \\
&= 2\hbar L_z
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[L_z, L_\pm] &= [L_z, L_x \pm iL_y] = \underbrace{[L_z, L_x]}_{i\hbar L_y} \pm i\underbrace{[L_z, L_y]}_{=-i\hbar L_x} \\
&= \pm\hbar L_x + i\hbar L_y = \pm\hbar(L_x \pm iL_y) = \pm\hbar L_\pm
\end{aligned}$$

$$[L^2, L_\pm] = \underbrace{[L^2, L_x]}_{=0} \pm i\underbrace{[L^2, L_y]}_{=0} = 0$$

Aufgabe 2 **(*)** *Wir bezeichnen die simultanen Eigenkets von L^2 und L_z mit $|l,m\rangle$, $l \in \mathbb{N}$ und $-l \leq m \leq +l$. Für die Auf- und Absteigeoperatoren des Drehimpulses $L_\pm = L_x \pm iL_y$ gilt*

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

Drücke L_x und L_y durch $L_\pm$ aus und zeige die Relationen

$$\langle l,m|L_xL_y + L_yL_x|l,m\rangle = 0$$

$$\langle l,m|L_x^2 - L_y^2|l,m\rangle = 0$$

Lösung:

$$\begin{aligned}
\langle l,m|L_xL_y + L_yL_x|l,m\rangle &= \frac{1}{4i}\langle l,m|\left(\left[(L_+ + L_-)(L_+ - L_-) + (L_+ - L_-)(L_+ + L_-)\right]|l,m\rangle\right)\\
&= \frac{1}{4i}\langle l,m|\left(\left[2L_+^2 + 2L_-^2 \underbrace{-L_+L_- + L_-L_+ + L_+L_- - L_-L_+}_{=0}\right]|l,m\rangle\right)\\
&= \frac{1}{2i}\langle l,m|\left(L_+^2\,|l,m\rangle\right) + \frac{1}{2i}\langle l,m|\left(L_-^2\,|l,m\rangle\right) = 0
\end{aligned}$$

Der letzte Schritt folgt, da $L_+^2\,|l,m\rangle \sim |l,m+2\rangle$ und $\langle l,m|l,m+2\rangle = 0$ wegen Orthogonalität der Eigenfunktionen. L_-^2 analog.

$$\begin{aligned}
\langle l,m|L_x^2 - L_y^2|l,m\rangle &= \langle l,m|\left(\left[\frac{1}{2^2}(L_+ + L_-)(L_+ + L_-) - \frac{1}{(2i)^2}(L_+ - L_-)(L_+ - L_-)\right]|l,m\rangle\right)\\
&= \frac{1}{4}\langle l,m|\left(\left[(L_+ + L_-)(L_+ + L_-) + (L_+ - L_-)(L_+ - L_-)\right]|l,m\rangle\right)\\
&= \frac{1}{4}\langle l,m|\left(\left[2L_+^2 + 2L_-^2 \underbrace{L_+L_- + L_-L_+ - L_+L_- - L_-L_+}_{=0}\right]|l,m\rangle\right)\\
&= \frac{1}{2}\langle l,m|\left(L_+^2\,|l,m\rangle\right) + \frac{1}{2}\langle l,m|\left(L_-^2\,|l,m\rangle\right) \underset{\text{siehe a)}}{=} 0
\end{aligned}$$

Aufgabe 3 **(*)** *Der Hamiltonoperator eines starren Rotators in einem Magnetfeld ist gegeben durch*

$$H = \frac{L^2}{2\Theta} + \gamma\vec{L}\cdot\vec{B}.$$

Dabei ist $\vec{L}$ und $\vec{B}$ das angelegte Magnetfeld. Θ (das Trägheitsmoment) und γ (der gyromagnetische Faktor) sind Konstanten. Das Magnetfeld ist konstant in z-Richtung: $\vec{B} = B\vec{e}_z$.
Wie lauten Energieeigenzustände des Systems? Berechne die Energieeigenwerte.

Lösung:
Es ist

$$H = \frac{L^2}{2\Theta} + \gamma L_z B.$$

Wir kennen simultane Eigenzustände von den Operatoren L^2 und L_z, nämlich genau unsere Kugelflächenfunktionen Y_{lm}. Dementsprechend sind das unsere Eigenzustände. Unsere Eigenenergien sind dann

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

Probleme in 3 Dimensionen

Aufgabe 4 **(*)** *Die normierten Wasserstoffeigenfunktionen für maximalen Bahndrehimpuls $l = n-1$ sind von der Form:*

$$\Psi_{n,n-1,m}(\vec{r}) = \frac{u_{n,n-1}(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad u_{n,n-1}(r) = \sqrt{\frac{2}{n(2n)!a_B}} \left(\frac{2r}{na_B}\right)^n e^{-\frac{r}{na_B}}$$

mit $a_B = \frac{\hbar}{m_e \alpha c}$.

a) *Bestimme den Abstand r_{max} an dem die radiale Wahrscheinlichkeitsdichte $P(r) = |u_{n,n-1}(r)|^2$ maximal wird und vergleiche r_max mit dem Mittelwert $\langle r \rangle$.*

b) *Berechne $\Delta r = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2}$. Wie hängt die relative Abweichung $\frac{\Delta r}{\langle r \rangle}$ von der Hauptquantenzahl n ab? Das Ergebnis verdeutlicht, dass für große n die Vorstellung einer Kreisbahn zulässig ist.*

Tipp: $\int_0^\infty dx\, x^q e^{-x} = q!$.

Lösung:

a)

$$P(r) = |u_{n,n-1}(r)|^2 = \frac{2}{n(2n)!a_B} \left(\frac{2r}{na_B}\right)^{2n} e^{-\frac{2r}{na_B}}$$

Da $P(r)$ positiv ist und im Urspung und Unendlichen verschwindet, nimmt es dazwischen sein Maximum an. Wir suchen also Extremstellen von $P(r)$:

$$\frac{dP(r)}{dr} = 0$$

Es gilt

$$\partial_x (x^{2n} e^{-x}) = e^{-x}(2nx^{2n-1} - x^{2n}) = 0 \quad \Rightarrow x_{max} = 2n$$

Es handelt sich um ein Maximum da es die einzige Extremstelle auf $(0, \infty)$ ist und ja mindestens ein Maximum existiert. Damit ist

$$r_{max} = \frac{na_B}{2} x_{max} = n^2 a_B.$$

Für den Erwartunswert gilt nach einer Substitution $x = \frac{2r}{na_B}$:

$$\langle r \rangle = \frac{na_B}{2} \frac{1}{(2n)!} \underbrace{\int_0^\infty dx\, x^{2n+1} e^{-x}}_{(2n+1)!} = n(n + \frac{1}{2}) a_B > r_{max}$$

b)

$$\langle r^2 \rangle = \left(\frac{na_B}{2}\right)^2 \frac{1}{(2n)!} \underbrace{\int_0^\infty dx\, x^{2n+2} e^{-x}}_{(2n+2)!} = n^2(n+1)(n + \frac{1}{2}) a_B^2$$

Damit gilt

$$\Delta r = \frac{a_B n}{2} \sqrt{2n+1}$$

und

$$\frac{\Delta r}{\langle r \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2n+1}} \xrightarrow{n \to \infty} 0$$

Für große n macht die Vorstellung als Kreisbahn einigermaßen Sinn.

Aufgabe 5 **(**)** *Behandle den dreidimensionalen harmonischen Oszillator in Kugelkoordinaten: Der Hamiltonoperator lautet*

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + \frac{M}{2} \omega^2 r^2.$$

a) *Reduziere die stationäre Schrödingergleichung auf eine Radialgleichung mit dem üblichen Ansatz* $\Psi(\vec{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$. *Vereinfache sie durch die Substitution mit den dimensionslosen Größen* $y = r\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}$ *und* $\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$.

b) *Zeige das das asymptotische Verhalten durch den Ansatz* $u(y) = y^{l+1} e^{-y^2/2} v(y^2)$ *berücksichtigt wird und bestimme die verbleibende Differentialgleichung für* $v(y^2)$

c) *Schreibe die DGL aus b) um, in eine DGL für* $v(\rho)$ *mit der Variablen* $\rho = y^2$.

d) *Setze eine Potenzreihe für* $v(\rho)$ *an. Die Abbruchbedingung liefert das Energiespektrum* $E_{nl} = \hbar\omega(2n + l + \frac{3}{2})$ *mit Quantenzahlen* n, l.

Lösung:

a) Die Radialgleichung lautet

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2}+\frac{M}{2}\omega^2 r^2-E\right)U(r)=0$$

Die Substitution ergibt

$$\left(\frac{d^2}{dy^2}-\frac{l(l+1)}{y^2}-y^2+2\epsilon\right)u(y)=0$$

b)

$$\begin{aligned} y\to 0: \qquad & u''(y)=\frac{l(l+1)}{y^2}u(y) \quad && \Rightarrow u(y)=y^{l+1} \\ y\to\infty: \qquad & u''(y)\approx(y^2-1)u(y) \quad && \Rightarrow u(y)=e^{-y^2/2} \end{aligned}$$

Der Ansatz $u(y)=y^{l+1}e^{-y^2/2}v(y^2)$ berücksichtigt also beides. Einsetzen in die DGL liefert eine Gleichung für v:

$$\left(\frac{d^2}{dy^2}+\frac{2}{y}(1+l-y^2)\frac{d}{dy}+2-2l-3\right)v(y^2)=0$$

c) Durch Anwenden der Kettenregel können wir sie umformen

$$4y^2v''(y^2)+2v'(y^2)+4(1+l-y^2)v'(y^2)+2\left(1-l-\frac{3}{2}\right)v(y^2)=0$$

Jetzt substituieren wir $\rho=y^2$ und bekommen:

$$\left[\rho\frac{d^2}{d\rho^2}+\left(l+\frac{3}{2}-\rho\right)\frac{d}{d\rho}+\nu\right]v(\rho)=0 \quad ,\nu=\frac{1}{2}(\epsilon-l-\frac{3}{2})$$

d) Mit dem Potenzreihenansatz $v(\rho)=\sum a_k\rho^k$ erhalten wir nach Koeffizientenvergleich

$$\frac{a_{k+1}}{a_k}=\frac{k-\nu}{(k+1)(k+l+3/2)} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{a_{k+1}}{a_k}\sim\frac{1}{k} \text{ für große } k$$

Wenn sie nie abbricht, verhält sich die Reihe wie die Exponentialreihe. Also

$$v(\rho)\approx e^{\rho} \quad \text{bzw.} \quad v(y^2)=e^{y^2}$$

Das widerspricht der Normierbarkeit von u. Die Reihe bricht also bei einem $n=\nu=\frac{1}{2}(\epsilon-l-\frac{3}{2})$ ab. Zurücksubstituieren von $\epsilon=\frac{E}{\hbar\omega}$ und auflösen der Gleichung nach E ergibt:

$$E_{nl}=\hbar\omega(2n+l+\frac{3}{2})$$

Aufgabe 6 **(*)** *Zeige für Vektoren $\vec{a}$, $\vec{b}$ und die Paulimatrizen $\vec{\sigma}$ die Regel:*

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}) = \vec{a}\cdot\vec{b} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})$$

Lösung:
Mit $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$ und $\sigma_i\sigma_j = i\epsilon_{ijk}\sigma_k$ für $i \neq j$ folgt:

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}) &= \sigma_x^2 a_x b_x + \sigma_y^2 a_y b_y + \sigma_z^2 a_z b_z + \sigma_x\sigma_y a_x b_y + \sigma_y\sigma_x a_y b_x + \sigma_x\sigma_z a_x b_z + \sigma_z\sigma_x a_z b_x \\ &\quad + \sigma_y\sigma_z a_y b_z + \sigma_z\sigma_y a_z b_y \\ &= \vec{a}\cdot\vec{b} + i\sigma_z(a_x b_y - a_y b_x) + i\sigma_y(a_z b_x - b_z a_x) + i\sigma_x(a_y b_z - a_z b_y) \\ &= \vec{a}\cdot\vec{b} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})\end{aligned}$$

Aufgabe 7 **(**)** *Wir betrachten den Spin eines ELektrons im magnetischen Feld $\vec{B}$. Der Hamiltonoperator lautet*

$$H = -\left(\frac{e}{m_e c}\right)\vec{S}\cdot\vec{B}$$

Wir wählen ein konstantes Magnetfeld in z-Richtung. Der Hamiltonoperator ist also einfach

$$H = \omega S_z \quad \textit{mit} \quad \omega = \frac{|e|B}{m_e c}.$$

a) *Was sind die Energieeigenwerte und Eigenzustände des Systems?*

b) *Zum Zeitpunktpunkt $t = 0$ befindet sich das System in dem Zustand*

$$|\alpha; t=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$$

(dem $|S_x;+\rangle$ Eigenzustand der S_x-Komponente). Benutze die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\alpha;t\rangle = H|\alpha;t\rangle$$

um $|\alpha;t\rangle$ zu bestimmen.

c) *Was ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich das Elektron zum Zeitpunkt t wieder im Zustand $|S_x;+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$ befindet. Wie groß ist also $|\langle S_x;+|\alpha;t\rangle|^2$?*

Lösung:

a) Da der Hamiltonoperator einfach ein Vielfaches von S_z ist, sind die Eigenzustände $|+\rangle$ und $|-\rangle$. Die entsprechenden Energieeigenwerte sind $\pm\frac{\hbar\omega}{2}$.

b) Eigenzustände $|\Psi(t=0)\rangle$ mit Eigenenergie E_Ψ entwickeln sich gemäß der zeitabhängigen Schrödingergleichung in der Form

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

Unser Anfangszustand $|\alpha; t=0\rangle$ ist ein Überlagerungszustand aus zwei Eigenzuständen des Hamiltonoperators. Die Eigenzustände entwickeln sich separat wie oben (Linearität der Schrödingergleichung). Also ist

$$|\alpha; t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[e^{-\frac{i\omega t}{2}}|+\rangle + e^{\frac{i\omega t}{2}}|-\rangle\right]$$

c)

$$\langle S_x; +|\alpha, t\rangle = \frac{1}{2}\Big[\langle +| + \langle -|\Big]\left[e^{-\frac{i\omega t}{2}}|+\rangle + e^{\frac{i\omega t}{2}}|-\rangle\right] = \frac{1}{2}\left[e^{-\frac{i\omega t}{2}} + e^{\frac{i\omega t}{2}}\right] = \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right)$$

also ist

$$|\langle S_x; +|\alpha, t\rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$$

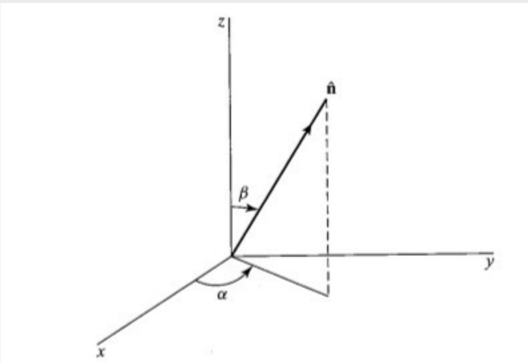
Aufgabe 8 **(**)** *Zeige, dass*

$$|\vec{S}\cdot\hat{n}; +\rangle \equiv \cos\left(\frac{\beta}{2}\right)|+\rangle + \sin\left(\frac{\beta}{2}\right)e^{i\alpha}|-\rangle$$

ein Eigenket von dem Operator

$$\vec{S}\cdot\hat{n}$$

ist. Die Winkel α und β sind aus dem Bild ablesbar:



Lösung:

$$\vec{S}\cdot\hat{n} = \sin(\beta)\cos(\alpha)S_x + \sin(\beta)\sin(\alpha)S_y + \cos(\beta)S_z$$

In Matrizendarstellung und mithilfe der Identität $\cos(\alpha) + i\sin(\alpha) = e^{i\alpha}$ ist:

$$\vec{S} \cdot \hat{n} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos(\beta) & \sin(\beta)e^{-i\alpha} \\ \sin(\beta)e^{i\alpha} & -\cos(\beta) \end{pmatrix}$$

Damit ist

$$\begin{aligned} \vec{S} \cdot \hat{n}\, |\vec{S} \cdot \hat{n}; +\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos(\beta) & \sin(\beta)e^{-i\alpha} \\ \sin(\beta)e^{i\alpha} & -\cos(\beta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) \\ \sin(\beta/2)e^{i\alpha} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos(\beta)\cos(\beta/2) + \sin(\beta)\sin(\beta/2) \\ e^{i\alpha}(\sin(\beta)\cos(\beta/2) - \cos(\beta)\sin(\beta/2)) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Jetzt benutzt man die trigonometrischen Identitäten

$$\cos(\beta) = \cos^2(\beta/2) - \sin^2(\beta/2) \quad \text{und} \quad \sin(\beta) = 2\cos(\beta/2)\sin(\beta/2)$$

und erhält mithilfe $\cos^2(\beta/2) + \sin^2(\beta/2) = 1$:

$$\vec{S} \cdot \hat{n}\, |\vec{S} \cdot \hat{n}; +\rangle = \frac{\hbar}{2} |\vec{S} \cdot \hat{n}; +\rangle$$