

Moderne Theoretische Physik II — Quantenmechanik II

V: Prof. Dr. D. Zeppenfeld, Ü: PD Dr. S. Gieseke

Lösung zur Klausur Nr. 2, 26.5.2020

Verwendete Formeln der Formelsammlung

Leiteroperatoren auf Drehimpulseigenzustände:

$$J_{\pm} |j m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j m \pm 1\rangle .$$

Kugelfunktionen:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (\sin \theta) e^{\pm i\phi}$$

Radiale Wasserstoffwellenfunktionen (Bohrscher Radius $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2$), nur implizit für die eindeutige Definition von R verwendet:

$$R_{20}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}, \quad R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$$

Lösungen

Aufgabe 1: Wasserstoffatom mit Störung

[5 + 10 + 4 · 15 + 10 = 85]

In einem einfachen H-Atom, nur mit Coulomb-Wechselwirkung und ohne Feinstruktur sind die Energien der Energiezustände $|n, \ell, m, m_s\rangle$ nur durch die Hauptquantenzahl n festgelegt. Wir untersuchen die Zustände mit $n = 2$, wenn sie durch eine Wechselwirkung

$$V = \frac{\alpha}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{r}$$

gestört werden. \vec{S} ist der Spinoperator und $\vec{r} = (x, y, z)$ der Ortsoperator. Die Entartung der $n = 2$ Zustände, Energien und Eigenzustände sollen diskutiert werden.

(a) *Wieviele Zustände mit $n = 2$ gibt es? Welche?* [5]

$n = 2$ erlaubt $\ell = 0$ mit $m = 0$ oder $\ell = 1$ mit $m = 0, \pm 1$ (vier Zustände), in jedem Zustand ist $m_s = \pm \frac{1}{2}$ erlaubt, also insgesamt 8 Zustände, die im ungestörten System entartet sind.

(b) *Wie verhält sich V unter Drehungen und Paritätstransformationen?*

Unter Paritätstransformationen werden Ortskoordinaten gespiegelt, also hier nur $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, \vec{S} bleibt unverändert. Also hat V negative Parität. [5]

\vec{S} und \vec{r} sind Tensoroperatoren vom Rang 1 (Vektoroperatoren), aber deren Produkt $\vec{S} \cdot \vec{r}$ ist ein Skalar unter Drehungen. Insgesamt ist V also ein Pseudoskalar. [5]

(c) Berechnen Sie

$$[V, \vec{L}] \quad \text{und} \quad [V, \vec{S}].$$

Wir untersuchen die Kommutatoren komponentenweise:

$$[S_i, V] = [S_i, \frac{\alpha}{\hbar} S_j r_j] = \frac{\alpha}{\hbar} r_j [S_i, S_j] = \alpha i \varepsilon_{ijk} r_j S_k, \quad [5]$$

wegen $[S_i, S_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} S_k$. Für $[L_i, V]$ betrachten wir

$$[L_i, r_m] = \varepsilon_{ijk} [r_j p_k, r_m] = \varepsilon_{ijk} r_j [p_k, r_m] = -\varepsilon_{ijk} r_j i\hbar \delta_{km} = -i\hbar \varepsilon_{ijm} r_j,$$

wegen $[r_i, p_j] = i\hbar$. Insgesamt gilt also

$$[L_i, V] = -\alpha i \varepsilon_{ijm} r_j S_m = -\alpha i \varepsilon_{ijk} r_j S_k = -[S_i, V]. \quad [5]$$

Insgesamt gilt also

$$[\vec{L} + \vec{S}, V] = 0 \quad \text{oder} \quad [\vec{J}, V] = 0.$$

Welche Quantenzahlen eignen sich, um die Zustände zu klassifizieren (warum)? [5]

Damit vertauscht V mit \vec{J}^2 und J_z , mit Quantenzahlen j, m_j und die gestörten Zustände lassen sich als $|j, m_j, \ell, s\rangle$ klassifizieren.

(d) Welche Auswahlregeln gibt es für $\Delta j, \Delta m_j, \Delta \ell, \Delta m_\ell, \Delta s, \Delta m_s$? [5]

Aufgrund der Kommutatoren gilt $\Delta j = \Delta m_j = 0$. ℓ kann und wird vom Operator geändert. Die Parität von ℓ -Zuständen ist $(-1)^\ell$ und V hat negative Parität. Darum muss sich ℓ um eine ungerade Zahl ändern. Da nur $\ell = 0, 1$ vorkommen, muss gelten $\Delta \ell = \pm 1$. Δm_ℓ ist nicht weiter eingeschränkt. V enthält L_i , die sich zu L_\pm, L_z kombinieren, also kann Δm_ℓ die Werte $0, \pm 1$ annehmen. $s = \frac{1}{2}$ ist unveränderlich. Zusammen mit Δm_ℓ muss gelten $\Delta m_s = 0, \pm \frac{1}{2}$, und zwar so, dass $\Delta m_j = \Delta m_\ell + \Delta m_s = 0$ bleibt.

Welche Matrixelemente geben nichtverschwindende Beiträge zur Energiekorrektur in erster Ordnung Störungstheorie? [5]

j kann nur die Werte $\frac{3}{2}$ oder $\frac{1}{2}$ annehmen. Ein $(j = \frac{3}{2})$ -Zustand kann nur aus $\ell = 1$ und $s = \frac{1}{2}$ gebildet werden. Wegen $\Delta \ell = 1$ verschwinden also alle Matrixelemente mit den vier Zuständen $j = \frac{3}{2}, m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}$, insgesamt $3 \cdot (4 \times 4)$ Matrixelemente. Es bleiben nur die (4×4) Matrixelemente mit den vier Zuständen

$$\left| j = \frac{1}{2}, m_j = \pm \frac{1}{2}, \ell = 0, 1, s = \frac{1}{2} \right\rangle.$$

Da $\Delta m_j = 0$ und $\Delta \ell = \pm 1$ bleiben nur vier Matrixelemente, die nicht verschwinden, von denen offensichtlich je zwei mit festem m_j und $\ell = 0, 1$ zueinander komplex konjugiert sind.

Die gleiche Diskussion kann auch für die Matrixelemente in der Basis $|\ell, m_\ell, s, m_s\rangle$ geführt werden. Hier bleiben jedoch zunächst acht Matrixelemente, da zu festem m_j jeweils zwei Zustände mit $\ell = 1$ einen Beitrag geben für die $m + m_s = \pm \frac{1}{2}$. Davon sind jeweils zwei zueinander komplex konjugiert. Alle anderen Matrixelemente verschwinden aufgrund der Auswahlregeln.

Argumentieren Sie, dass die nichtverschwindenden Matrixelemente alle einen Wert c oder den komplex konjugierten c^* annehmen, c ist ein zunächst unbestimmter Wert. [5]

Wir wenden nacheinander J_- und dann J_+ auf einen Zustand $|jm\rangle$ an,

$$\begin{aligned} J_+J_- |jm\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - (m-1)(m-1+1)}\hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |jm\rangle \\ &= \hbar^2(j(j+1) - m(m-1)) |jm\rangle \end{aligned}$$

Also

$$\langle jm | VJ_+J_- |jm\rangle = \hbar^2(j(j+1) - m(m-1))\langle jm | V |jm\rangle$$

Da $[V, \vec{J}] = 0$, gilt auch $[V, J_{\pm}] = 0$. Da $J_+ = J_x + iJ_y = J_-^\dagger$ (J_i sind hermitesch), gilt bei Anwendung der Leiteroperatoren jeweils nach rechts und links ebenso

$$\begin{aligned} \langle jm | VJ_+J_- |jm\rangle &= \langle jm | J_+VJ_- |jm\rangle = \langle J_-(jm) | V |J_-(jm)\rangle \\ &= \hbar^2(j(j+1) - m(m-1))\langle jm-1 | V |jm-1\rangle \end{aligned}$$

also insgesamt

$$\langle jm | V |jm\rangle = \langle jm-1 | V |jm-1\rangle.$$

Das gleiche gilt analog für die umgekehrte Reihenfolge J_-J_+ statt J_+J_- , und damit für alle Matrixelemente, die sich nur in m unterscheiden. Es gibt für uns also vier Matrixelemente, zwei (je eines für $m_j = \pm\frac{1}{2}$) mit einem Wert c und zwei komplex konjugierte mit c^* .

Die Argumentation funktioniert in der $|\ell, m, s, m_s\rangle$ Basis nicht, da die verwendeten Vertauschungsrelation hier nicht anwendbar sind. Es gibt verschiedene Werte der Matrixelemente, je nach dem Wert von m_ℓ und m_s .

- (e) Drücken Sie Zustände $|j = \frac{1}{2}, j_z = \pm\frac{1}{2}\rangle$ durch Zustände $|\ell, m\rangle \otimes |s, m_s\rangle$ mit $\ell = 0, 1$ aus. Berechnen Sie Clebsch-Gordan Koeffizienten explizit. $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ mit den dazugehörigen Quantenzahlen.

Wir schreiben die j -Zustände wie in der Vorlesung als einfaches ket $|jm\rangle$ und die beiden gekoppelten Zustände als doppeltes ket, $|\ell m_\ell\rangle |s m_s\rangle$. Bei $\ell = 0, s = \frac{1}{2}$ gibt es nur jeweils einen Zustand,

$$|\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle = |00\rangle |\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$$

Für $\ell = 1$ beginnen wir mit dem eindeutigen Zustand höchsten Gewichts,

$$|\frac{3}{2} \frac{3}{2}\rangle = |11\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \quad [5]$$

und wenden auf beiden Seiten einmal den Absteigeoperator J_- an und erhalten

$$\hbar\sqrt{3}|\frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle = \hbar\sqrt{2}|10\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \hbar|11\rangle |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle,$$

also

$$|\frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|10\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|11\rangle |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle. \quad [5]$$

Der Zustand $|\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$ muss orthogonal zu $|\frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle$ sein, also bekommen wir

$$|\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|11\rangle |\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|10\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$$

mit der Vorzeichenwahl nach Condon-Shortley Konvention. $|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle$ entspricht diesem mit jeweils negativen m_ℓ und m_s und insgesamt negativem Vorzeichen $(-1)^{j-\ell-s} = -1$. [5]

(f) Berechnen Sie die Matrixelemente

$$\langle n = 2, \ell = 0, j, j_z | V | n = 2, \ell = 1, j, j_z \rangle$$

mit Hilfe der Ortsdarstellung der Bahndrehimpulszustände. Führen Sie nur die Winkelintegrale aus. Berechnen Sie c/R , wobei R der (nicht zu berechnende) Wert der radialen Integration ist,

$$R = \int_0^\infty r^2 dr r R_{21}^*(r) R_{20}(r).$$

Wir untersuchen nur Matrixelemente mit $j = \frac{1}{2}$ und lassen dementsprechend die Angabe von j im Folgenden weg. Wir kürzen wie üblich die Zustände $n = 2, \ell = 0, 1$ mit $2s, 2p$ ab. Um die z -Komponenten von \vec{J} und \vec{S} zu unterscheiden, schreiben wir für $m_j = \pm\frac{1}{2}$ nur \pm und für $m_s = \pm\frac{1}{2}$ nur $\uparrow\downarrow$. Nach der Diskussion oben müssen wir nur ein Matrixelement berechnen, denn

$$\langle 2s+ | V | 2p+ \rangle = \langle 2p+ | V | 2s+ \rangle^* = \langle 2s- | V | 2p- \rangle = \langle 2p- | V | 2s- \rangle^*.$$

Wir berechnen

$$c = \langle 2s+ | V | 2p+ \rangle.$$

In $V = \alpha \vec{S} \cdot \vec{r} / \hbar$ kommt nicht \vec{J} , sondern \vec{S} vor, ebenso die Ortskoordinaten x, y, z und wir können für unsere Zwecke umformen zu

$$\begin{aligned} \vec{S} \cdot \vec{r} &= xS_x + yS_y + zS_z = x \frac{S_+ + S_-}{2} + y \frac{S_+ - S_-}{2} + zS_z \\ &= \frac{1}{2} [(x - iy)S_+ + (x + iy)S_- + 2zS_z] \\ &= \frac{1}{2} r \left[e^{-i\varphi} \sin \vartheta S_+ + e^{i\varphi} \sin \vartheta S_- + 2 \cos \vartheta S_z \right]. \end{aligned} \quad [5]$$

Dabei haben wir die Leiteroperatoren $S_\pm = S_x \pm iS_y$ verwendet und im letzten Schritt sphärische Polarkoordinaten (r, ϑ, φ) eingeführt. Wir kennen einerseits die Ortsdarstellung der Wasserstoffwellenfunktionen in der Basis $|n \ell m\rangle$ und kennen die Spinzustände $|m_s\rangle = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$. In Teilaufgabe (e) haben wir die $(j = \frac{1}{2})$ -Zustände durch die $|\ell m\rangle |s m_s\rangle$ ausgedrückt,

$$|2s+\rangle = |j = \frac{1}{2}, m_j = +\frac{1}{2}, \ell = 0, s = \frac{1}{2}\rangle = |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle = |00\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \equiv |2s0\uparrow\rangle$$

sowie

$$\begin{aligned} |2p+\rangle &= |j = \frac{1}{2}, m_j = +\frac{1}{2}, \ell = 1, s = \frac{1}{2}\rangle = |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2}{3}} |11\rangle |\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |10\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \\ &\equiv \sqrt{\frac{2}{3}} |2p1\downarrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |2p0\uparrow\rangle. \end{aligned}$$

Mit

$$S_z |\uparrow, \downarrow\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |\uparrow, \downarrow\rangle, \quad S_+ |\downarrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle, \quad S_- |\uparrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle,$$

und der Orthogonalität der s -Zustände können wir $\vec{S} \cdot \vec{r}$ anwenden:

$$c = \frac{\alpha}{\hbar} \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \langle 2s0\uparrow | V | 2p1\downarrow \rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} \langle 2s0\uparrow | V | 2p0\uparrow \rangle \right] \\ = \frac{\alpha}{2} \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \langle 2s0 | r e^{-i\varphi} \sin \vartheta | 2p1 \rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} \langle 2s0 | r \cos \vartheta | 2p0 \rangle \right] \quad [5]$$

Nun können wir in der Ortsdarstellung die Wellenfunktionen in Polarkoordinaten einsetzen und die Integrationen ausführen. Anstelle der direkten Integration setzen wir auch für die übrigen Operatoren in der Ortsdarstellung Kugelfunktionen ein,

$$e^{-i\varphi} \sin \vartheta = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^{-1}(\Omega), \quad \cos \vartheta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0(\Omega).$$

und ersetzen die Radialfunktionen durch R , wie in der Aufgabenstellung angegeben,

$$c = \frac{\alpha R}{2} \int d\Omega \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_0^{0*}(\Omega) Y_1^{-1}(\Omega) Y_1^1(\Omega) - \sqrt{\frac{1}{3}} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_0^{0*}(\Omega) Y_1^0(\Omega) Y_1^0(\Omega) \right].$$

Für Y_0^0 setzen wir direkt ein $Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$, Y_1^0 ist reell und $Y_1^{-1} = Y_1^{1*}$,

$$c = \frac{\alpha R}{2} \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{\frac{8\pi}{3 \cdot 4\pi}} \int d\Omega Y_1^{1*}(\Omega) Y_1^1(\Omega) - \sqrt{\frac{1}{3}} \sqrt{\frac{4\pi}{3 \cdot 4\pi}} \int d\Omega Y_1^0(\Omega)^* Y_1^0(\Omega) \right],$$

so dass wir anstelle der Integrationen die Orthogonalitätsrelationen der Kugelfunktionen verwenden können, die in der angegebenen Form auf 1 normiert sind. Damit bekommen wir das Resultat

$$c = \frac{\alpha R}{2} \left[\frac{2}{3} - \frac{1}{3} \right] = \frac{\alpha R}{6}$$

und die Antwort $c/R = \alpha/6$.

[5]

- (g) Welche Eigenzustände gibt es zu welcher Energiekorrektur? Wie wird also die Entartung der $n = 2$ -Zustände aufgehoben?

Mit den bekannten reellen Matrixelementen c in der $|j m_j \ell s\rangle$ -Basis haben wir die Störmatrix. Diese hat zwei 2×2 -Blöcke der gleichen Gestalt, jeweils für $m_j = \pm \frac{1}{2}$. Wir bekommen also in einer Basis $|2s j = \frac{1}{2}, m_j\rangle, |2p j = \frac{1}{2}, m_j\rangle$ die Störungen

$$\begin{matrix} & |2s-\rangle & |2p-\rangle & & |2s+\rangle & |2p+\rangle \\ \begin{matrix} |2s-\rangle \\ |2p-\rangle \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & c \\ c & 0 \end{pmatrix} & & = & \begin{matrix} |2s+\rangle \\ |2p+\rangle \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & c \\ c & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} = c\sigma_x.$$

Wir kennen die Eigenwerte und Eigenvektoren der Pauli-Matrix σ_x , also haben wir die Eigenwerte $\pm c$ zu den Eigenvektoren

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|2s j = \frac{1}{2}, m_j\rangle \pm |2p j = \frac{1}{2}, m_j\rangle \right). \quad [5]$$

Als Resultat der Störung V bekommen wir folgendes Gesamtergebnis: von den acht entarteten Zuständen mit Energie E_0 bleiben vier ungestörte Zustände mit $j = \frac{3}{2}$. Eine Korrektur erfahren die Zustände

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|2s j = \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle + |2p j = \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle \right) & \quad \text{zu} \quad E = E_0 + \frac{\alpha R}{6}, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|2s j = \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle - |2p j = \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}\rangle \right) & \quad \text{zu} \quad E = E_0 - \frac{\alpha R}{6}. \end{aligned} \quad [5]$$

Aufgabe 2: Identische Teilchen im Dreieck

[15]

Drei identische Teilchen mit Spin $s = 0$ befinden sich an den Ecken eines gleichseitigen Dreiecks. Das System kann sich frei um die z -Achse, die senkrecht zum Dreieck durch dessen Mittelpunkt verläuft, drehen. Welche Einschränkungen an die Eigenwerte vom Drehimpuls J_z gibt es (warum)?

Es handelt sich um drei ununterscheidbare Teilchen ohne Spin. Die Drehung eines Zustandes $|\psi\rangle$ um einen Winkel α um die z -Achse ist durch

$$D_z(\alpha) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z\right)$$

gegeben. Wenn $J_z |\psi\rangle = \hbar m |\psi\rangle$ ergibt, muss aufgrund der Symmetrie des Systems

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{2\pi}{3}J_z\right) |\psi\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\frac{4\pi}{3}J_z\right) |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

gelten. Oder mit einer ganzen Zahl n

$$\frac{2\pi}{3}m = 2\pi n.$$

Das ist erfüllt, wenn $m = 3n$. Damit ergibt auch die Drehung um $\alpha = 4\pi/3$ wieder die gleiche Wellenfunktion. Die Bedingung für $\alpha = 4\pi/3$ allein würde $m = 3n/2$ ergeben, womit nicht beide Bedingungen gleichzeitig erfüllt werden können.

*) Die detailliertere Bewertung der Aufgabenteile gibt eine Orientierung.