

Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Wintersemester 2021/22

Übungsblatt 12

Abgabe der mit (*) gekennzeichneten Aufgaben: Dienstag, 25. Januar, Anfang der Vorlesung

18. Januar 2022

Aufgabe P11: Zwei-Minuten-Fragen

1. Wie ändern sich Kugelflächenfunktionen unter der Paritätstransformation $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$? Für welche l ist die Parität gerade bzw. ungerade?
2. Zeigen Sie mit Hilfe der Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen, wie man auf einfache Weise beliebige Funktionen der Form $f(\theta, \phi)$ in ihnen entwickeln kann.
3. Betrachten Sie ein (dreidimensionales) sphärisch symmetrisches Potential. In wie vielen Dimensionen muss man die Schrödingergleichung effektiv lösen? Wie heißt die zugehörige Gleichung?
4. Warum kann man die Lösung der Schrödingergleichung für ein sphärisch symmetrisches Potential schreiben als $\psi_{E,l,m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} u_{E,l}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$? Erklären Sie jeden Faktor auf der rechten Seite und die Indizes.
5. Gegeben sei ein beliebiges sphärisch symmetrisches Potential mit endlicher Reichweite, d.h. $V = 0$ für $r > R$. Was sind die Eigenfunktionen für $r > R$?
6. Nehmen Sie an, ein sphärisch symmetrisches Potential hat einen gebundenen Zustand in der P-Welle ($l = 1$). Würden Sie dann auch gebundene Zustände mit $l = 0$ erwarten? Begründen Sie Ihre Antwort.

Aufgabe H34: Entartung des starren Rotors (*) (6 Punkte)

Betrachten Sie einen sphärisch-symmetrischen starren Rotor mit Trägheitsmoment $I = I_x = I_y = I_z$, dessen Energie klassisch gegeben ist durch

$$E = \frac{\mathbf{L}^2}{2I}. \quad (1)$$

1. Bestimmen Sie die Eigenzustände und Eigenwerte des Hamiltonoperators.

LÖSUNG: Die Eigenzustände des $\mathbf{L}^2$ -Operators sind die Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\theta, \phi)$ (bzw. $|l, m\rangle$) mit Eigenwerten $\hbar^2 l(l+1)$. Die Energien sind deshalb

$$E_{lm} = E = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}. \quad (2)$$

2. Wie oft ist der n -te Energieeigenwert entartet?

LÖSUNG: Die Energien E_{lm} sind unabhängig von der magnetischen Quantenzahl m . Für gegebenen Drehimpuls l sind die Energien daher $(2l + 1)$ -fach entartet.

3. Das Trägheitsmoment in z -Richtung ändert sich nun zu $I_z = (1 + \epsilon)I$, während I_x und I_y unverändert sind.

Bestimmen Sie die neuen Eigenzustände und Eigenwerte des Hamiltonoperators.

LÖSUNG: Der Hamiltonian ist nun

$$H = \frac{L_x^2 + L_y^2}{2I} + \frac{L_z^2}{2I(1 + \epsilon)} = \frac{\mathbf{L}^2 - L_z^2}{2I} + \frac{L_z^2}{2I(1 + \epsilon)} = \frac{\mathbf{L}^2}{2I} - \frac{\epsilon}{1 + \epsilon} \frac{L_z^2}{2I}. \quad (3)$$

Da die Kugelflächenfunktionen gleichzeitig Eigenfunktionen zu $\mathbf{L}^2$ und L_z sind, sind sie auch Eigenfunktionen dieses Hamiltonoperators. Die Energien sind dann gegeben durch

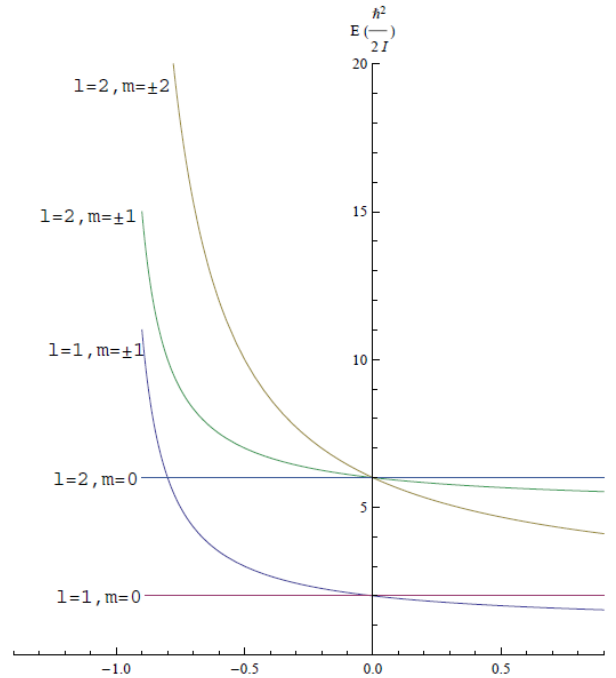
$$E_{lm} = \frac{\hbar^2 l(l + 1)}{2I} - \frac{\epsilon}{1 + \epsilon} \frac{\hbar^2 m^2}{2I}. \quad (4)$$

4. Skizzieren Sie das Energiespektrum als Funktion von ϵ . Für welches Vorzeichen von ϵ nähern sich die Energien an? Begründen Sie.

LÖSUNG: Wir betrachten zunächst den Energieunterschied zwischen zwei Zuständen,

$$|E_{l'm'} - E_{lm}| = \left| \frac{\hbar^2}{2I} [l'(l' + 1) - l(l + 1)] \right| + \left| \frac{\epsilon}{1 + \epsilon} \right| \left| \frac{\hbar^2}{2I} [m'^2 - m^2] \right|. \quad (5)$$

Der erste Term ist unabhängig von ϵ und stellt daher nur eine Konstante dar. Der zweite Term ist proportional zu $|\frac{\epsilon}{1 + \epsilon}|$. Hierfür gilt $\frac{\epsilon}{1 + \epsilon} \leq \frac{\epsilon}{1 - \epsilon}$. Wir schließen daraus, dass die Energien für $\epsilon > 0$ näher sind. Wir skizzieren das Spektrum für $l = 1, 2$:



5. Wie oft ist der n -te Energieeigenwert jetzt entartet? Wurde die Entartung vollständig aufgehoben? Falls ja, diskutieren Sie, wie die Entartung nur teilweise aufgehoben werden kann. Falls nein, wie könnte die Entartung vollständig aufgehoben werden?

LÖSUNG: Die Energieeigenwerte sind unabhängig von dem Vorzeichen von m , d.h. $\pm m$ führt zu gleichen Energien. Die Entartung des Spektrums ist deshalb nur teilweise aufgehoben. Der Grund hierfür liegt in der $L_z \rightarrow -L_z$ Symmetrie des Systems, so dass die Drehrichtung des Systems nicht sein Energiespektrum ändert.

Also kann die verbliebene Entartung aufgehoben werden, indem zum Hamilton-Operator ein Term hinzuaddiert wird, der linear in L_z ist. Die Energiekorrektur im Hamiltonian ist dann proportional zu m . Dies kann praktisch beispielsweise realisiert werden, indem ein magnetisches Feld an den elektrisch geladenen Rotor angelegt wird. (Für Details dazu wird hier auf das Kapitel zum Zeeman-Effekt verwiesen, das in einigen Wochen in der Vorlesung besprochen werden wird.)

Aufgabe H35: Sphärisches Shell-Potential (*) (4 Punkte)

Ein Teilchen bewegt sich in dem sphärisch-symmetrischen Potential (mit $0 < a < b$)

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r < a, \\ 0 & a \leq r \leq b, \\ \infty & r > b. \end{cases} \quad (6)$$

Berechnen Sie das Spektrum für Drehimpuls $l = 0$.

HINWEIS: Machen Sie den Ansatz

$$R_l(r) = j_l(kr) \cos \alpha + n_l(kr) \sin \alpha \quad (7)$$

mit sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen (j_l und n_l) und leiten Sie zwei Gleichungen her, die k und α bestimmen.

LÖSUNG:

Anmerkung zum Ansatz

Wir nutzen die aus der Vorlesung bekannte radiale Schrödingergleichung, die im gegebenen Fall für $a \leq r \leq b$ lautet (hier notiert mit $R_l(r) = u_l(r)/r$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{1}{r^2} \partial_r r^2 \partial_r \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \right] R_l(r) = 0. \quad (8)$$

Wir setzen $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ und berechnen die Ableitungen nach r :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \partial_r - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] R_l(r) = 0. \quad (9)$$

Wir substituieren nun die Funktion $R_l(r)$ mit einer Funktion $f_l(kr)$ mit $z = kr$. So erhalten wir

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2}{z} \partial_z - \frac{l(l+1)}{z^2} + 1 \right] f_l(z) = 0. \quad (10)$$

Dies ist die sphärische Besselsche Differentialgleichung, sie wird gelöst durch die sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen $j_l(z)$ und $n_l(z)$.

Eigentliche Lösung der Aufgabe

Man kann nun den gegebenen Ansatz verwenden, die sphärischen Bessel- und Neumann-Funktionen für $l = 0$ einsetzen,

$$j_0(kr) = \frac{\sin(kr)}{kr}, \quad n_0(kr) = -\frac{\cos(kr)}{kr}, \quad (11)$$

die Ableitungen ausführen und man sieht, dass dieser Ansatz die Schrödingergleichung mit $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ löst.

Um k und α zu berechnen, brauchen wir zunächst Anschlussbedingungen. Innerhalb der beiden unendlich hohen Potentialwälle muss die Wellenfunktion verschwinden, daher muss sie auch an den Anschlusspunkten a und b gleich 0 sein. Es muss also gelten

$$\frac{\sin(ka)}{ka} \cos \alpha - \frac{\cos(ka)}{ka} \sin \alpha = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\sin(kb)}{kb} \cos \alpha - \frac{\cos(kb)}{kb} \sin \alpha = 0. \quad (13)$$

Aus Gleichung (12) erhalten wir

$$\tan \alpha = \tan(ka) \quad (14)$$

und somit ist

$$\alpha = ka + n'\pi, \quad n' \in \mathbb{Z}. \quad (15)$$

Dieses Ergebnis setzen wir nun in Gleichung (13) ein und verwenden ein Additionstheorem

$$\frac{1}{kb} (\sin(kb) \cos(ka + n'\pi) - \cos(kb) \sin(ka + n'\pi)) = 0 \quad (16)$$

$$\Rightarrow \sin(k(b-a) + n'\pi) = 0 \quad (17)$$

$$\Rightarrow k(b-a) = n\pi, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (18)$$

Wir erhalten also

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{b-a} \right)^2, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (19)$$

Aufgabe H36: Harmonischer Oszillator plus $\hat{L}_z$ Term

Betrachten Sie den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{\mathbf{r}}^2 - \omega_z\hat{L}_z,$$

und bestimmen Sie die Eigenfunktionen und entsprechenden Eigenwerte. Gibt es Einschränkungen für die erlaubten Werte von ω_z ?

LÖSUNG: Der Hamiltonoperator lässt sich schreiben als:

$$\hat{H} = \hat{H}_{HO} - \omega_z\hat{L}_z. \quad (20)$$

Für den vorderen Teil gilt mit der Eigenbasis des sphärischen harmonischen Oszillators $\{|nlm\rangle\}$:

$$\hat{H}_{HO} |nlm\rangle = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right) |nlm\rangle \quad (21)$$

Bekanntermaßen sind die $|lm\rangle$ -Zustände Eigenzustände von $\hat{L}_z$. Da $\hat{L}_z$ von r unabhängig ist, sind also auch die $|nlm\rangle$ -Zustände Eigenzustände von $\hat{L}_z$. (Anmerkung: Da $\hat{H}_{HO}$ und $\hat{L}_z$ wegen

$$[\hat{L}_z, \hat{\mathbf{p}}^2] = 0, \quad [\hat{L}_z, \hat{\mathbf{r}}^2] = 0 \quad (22)$$

vertauschen (siehe H29.5), müssen diese eine simultane Eigenbasis haben. Diese ist gerade durch die $|nlm\rangle$ -Zustände gegeben.)

Es gilt:

$$\hat{H} |nlm\rangle = \hat{H}_{HO} |nlm\rangle - \omega_z\hat{L}_z |nlm\rangle = \left(\hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right) - \hbar\omega_z m_z \right) |nlm\rangle \quad (23)$$

$$E_{nlm} = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2} - \frac{\omega_z}{\omega} m_z \right) \quad (24)$$

Betrachtet man E_{nlm} so wird für $\omega_z > \omega$ für große l beliebig negativ. Das Energiespektrum muss nach unten beschränkt sein, es muss einen Grundzustand geben. Dies ist nur für $\omega_z \leq \omega$ erfüllt. Hier ist das Spektrum nach unten beschränkt, da $-l \leq m_z \leq l$ ist.