

Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Wintersemester 2021/22

Übungsblatt 15

Abgabe der mit (*) gekennzeichneten Aufgaben: Dienstag, 15. Februar, Anfang der Vorlesung

8. Februar 2022

Aufgabe P14: Zwei-Minuten-Fragen

1. Die Auswahlregeln für Übergänge im Wasserstoffatom sind $\Delta l = \pm 1$ und $\Delta m = 0, \pm 1$. Wie viele Spektrallinien sieht man für den Übergang vom ersten angeregten Zustand in den Grundzustand für das Wasserstoffatom in einem homogenen Magnetfeld bzw. einem schwachen homogenen elektrischen Feld?
2. Welchen Wert muss das externe Magnetfeld B annehmen, damit die Aufspaltung des ersten angeregten Zustands im Wasserstoffatom $0,1 \text{ eV}$ beträgt? Vergleichen Sie die Stärke des Feldes mit der des Erdmagnetfeldes $B_{\text{Erde}} \approx 50 \mu\text{T}$.
3. Skizzieren Sie, wie Sie die Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms mit einer Variationsrechnung bestimmen würden. Wie würden Sie den Ansatz für die Wellenfunktion und Variationsparameter wählen?
4. Welche Werte kann der Spin S eines Teilchens annehmen? Können Spinoperatoren als $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ dargestellt werden?
5. In der Vorlesung haben wir die Darstellung des Spin-Operators für $S = 1/2$ durch die Pauli-Matrizen $\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$ ausgedrückt. Beschreiben Sie, wie sich diese Darstellung für $S = 1$ ändert und stellen Sie speziell den Operator S_z in der Basis dar.
6. Nennen Sie drei Eigenschaften der Pauli-Matrizen.

HINWEIS: Weitere hilfreiche Relationen für die Pauli-Matrizen:

- Kommutator: $[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\varepsilon_{jkl}\sigma_l$ (Summation von l über x, y, z).
- Antikommutator: $\{\sigma_j, \sigma_k\} \equiv \sigma_j\sigma_k + \sigma_k\sigma_j = 2\delta_{jk}\mathbb{1}$.
- Daraus ergibt sich für das Produkt von Pauli-Matrizen: $\sigma_j\sigma_k = \delta_{jk}\mathbb{1} + i\varepsilon_{jkl}\sigma_l$.

Aufgabe H43: Variationsrechnung für das Heliumatom (*) (5 Punkte)

Betrachten Sie das Heliumatom mit dem Hamiltonoperator (für $m_e \ll m_p$)

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_e} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_e} - \frac{2\alpha\hbar c}{\hat{r}_1} - \frac{2\alpha\hbar c}{\hat{r}_2} + \frac{\alpha\hbar c}{|\hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2|}. \quad (1)$$

Machen Sie den Ansatz (Produkt zweier Wasserstoffatome)

$$\psi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{A^3}{\pi r_0^3} e^{-A(r_1+r_2)/r_0} \quad (2)$$

für die Grundzustandswellenfunktion und bestimmen Sie die Grundzustandsenergie durch Variationsrechnung mit dem Parameter A . Vergleichen Sie das Ergebnis mit der exakten Energie $E_{\text{exakt}} = -2.904 \alpha^2 m_e c^2$.

HINWEIS: Verwenden Sie sphärische Koordinaten mit dem Winkel θ zwischen \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 für das Integral mit $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1}$.

LÖSUNG: Der zu verwendene Ansatz für die Wellenfunktion ist bereits normiert. Zu bestimmen ist somit das Integral

$$E_A = \langle \psi_A | \hat{H} | \psi_A \rangle = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \psi_A^* H \psi_A \quad (3)$$

$$= \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \psi_A^* \left[\left(\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_e} \right) - \left(\frac{2\alpha\hbar c}{r_1} + \frac{2\alpha\hbar c}{r_2} \right) + \frac{\alpha\hbar c}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right] \psi_A, \quad (4)$$

welches in Kugelkoordinaten berechnet wird. Der quadrierte Impulsoperator ist in diesen Koordinaten durch folgenden Ausdruck gegeben:

$$\langle r | \hat{\mathbf{p}}^2 | r \rangle = -\hbar^2 \left(\frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right). \quad (5)$$

Einsetzen dieses Ausdrucks in das erste Integral aus Zeile (4) ergibt

$$16\pi^2 \int dr_1 r_1^2 \int dr_2 r_2^2 \psi_A^* \frac{1}{2m_e} (\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2) \psi_A = \frac{A^2 \hbar^2}{m_e r_0^2} = \frac{e^2}{r_0} A^2, \quad (6)$$

wobei $\frac{\hbar^2}{m_e} = e^2 r_0$ verwendet wurde und die Integration über die Winkelvariablen bereits ausgeführt war.

Für das zweite Integral aus Zeile (4) erhalten wir

$$16\pi^2 \int dr_1 r_1^2 \int dr_2 r_2^2 \psi_A^* (-2\alpha\hbar c) \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \psi_A = -4\alpha\hbar c \frac{A}{r_0} = -\frac{e^2}{r_0} 4A, \quad (7)$$

wobei $\alpha = e^2/(\hbar c)$ eingesetzt wurde.

Die ersten beiden Terme des Hamiltonoperators entsprechen formal den Hamiltonoperatoren des Wasserstoffatoms, für die Energie erhalten wir damit jeweils:

$$E_1 = \frac{A^2 \hbar^2}{2m_0 r_0^2} - 2\alpha\hbar c \frac{A}{r_0}. \quad (8)$$

Für die dritte Integration aus Zeile (4) ist eine Winkelintegration nicht mehr trivial:

$$\begin{aligned}
\int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} &= \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta}} \\
&= 4\pi \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\cos \theta \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta}} \\
&= -\frac{8\pi^2}{r_1r_2} \left(\sqrt{(r_1 - r_2)^2} - \sqrt{(r_1 + r_2)^2} \right) \\
&= \frac{8\pi^2}{r_1r_2} (r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|).
\end{aligned} \tag{9}$$

Für $r_2 > r_1$ erhalten wir den Wert $16\pi^2/r_2$ für das Integral. Wenn dagegen $r_2 < r_1$ gilt, erhalten wir $16\pi^2/r_1$. Weiterhin ergibt die Integration des Radialteils im ersten Fall:

$$\alpha \hbar c \frac{16A^6}{r_0^6} \int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-2A/r_0 r_1} \left(\int_{r_1}^\infty dr_2 r_2 e^{-2A/r_0 r_2} \right) = \frac{e^2}{r_0} \frac{5}{16} A. \tag{10}$$

Für den anderen Fall erhalten wir das gleiche Ergebnis. Beide Fälle kommen im Gesamtausdruck vor und werden deshalb addiert.

Für E_A erhalten wir also insgesamt aus Gln. (6, 7, 10).

$$E_A = \frac{e^2}{r_0} \left(A^2 - A \left(4 - \frac{5}{8} \right) \right). \tag{11}$$

Dies wird minimiert durch $A = 2 - \frac{5}{16} = 1.6875$. Das kann man derart interpretieren, dass das Elektron nicht mehr die gesamte Kernladung spürt, sondern eine vom anderen Elektron teilweise abgeschirmte.

Für eine Abschätzung der Grundzustandsenergie erhalten wir:

$$E_0 = -\frac{729}{256} \frac{e^2}{r_0} = -2.847 \alpha^2 m_e c^2 \approx -77 \text{ eV}. \tag{12}$$

Das exakte Ergebnis hat den Wert:

$$E_{\text{exakt}} = -2.904 \alpha^2 m_e c^2 \approx -79 \text{ eV}. \tag{13}$$

Aufgabe H44: Störungstheorie für Elektronenspin im Magnetfeld (*) (5 Punkte)

Betrachten Sie den Hamiltonoperator für ein Spin-1/2-Teilchen in einem magnetischen Feld entlang der z -Achse und einer kleinen Störung entlang der x -Achse.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}', \tag{14}$$

wobei

$$\hat{H}_0 = -\mu_B B g \frac{\hat{S}_z}{\hbar} \approx -\mu_B B \sigma_z, \tag{15}$$

$$\hat{H}' = -\mu_B B g \frac{\hat{S}_x}{\hbar} \approx -\mu_B B \sigma_x. \tag{16}$$

1. Finden Sie die Energieeigenwerte und die zugehörigen Eigenzustände für H_0 .

LÖSUNG:

$$\hat{H}_0 = -\mu B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow E_{\pm}^{(0)} = \pm\mu B. \quad (17)$$

Und die Eigenzustände sind

$$|\chi_{\pm}^{(0)}\rangle = |\mp\rangle. \quad (18)$$

2. Berechnen Sie die Energiekorrekturen in erster Ordnung Störungstheorie.

LÖSUNG:

$$\hat{H}' = -\mu B \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Die Energiekorrektur für beide Zustände ist

$$E^{(1)} = \langle \chi_{\pm}^{(0)} | \lambda \hat{H}' | \chi_{\pm}^{(0)} \rangle = 0. \quad (20)$$

3. Berechnen Sie die Energiekorrekturen in zweiter Ordnung.

LÖSUNG:

$$E_+^{(2)} = \frac{|\langle \chi_-^{(0)} | \lambda \hat{H}' | \chi_+^{(0)} \rangle|^2}{E_+^{(0)} - E_-^{(0)}} = \lambda^2 \frac{1}{2} \mu B, \quad (21)$$

$$E_-^{(2)} = \frac{|\langle \chi_+^{(0)} | \lambda \hat{H}' | \chi_-^{(0)} \rangle|^2}{E_-^{(0)} - E_+^{(0)}} = -\lambda^2 \frac{1}{2} \mu B. \quad (22)$$

wobei $\langle \chi_+^{(0)} | \hat{H}' | \chi_-^{(0)} \rangle = \langle \chi_-^{(0)} | \hat{H}' | \chi_+^{(0)} \rangle = -\mu B$.

Dann gilt für die Energie

$$E_{\pm} = E_{\pm}^{(0)} + E_{\pm}^{(2)} = \pm\mu B(1 + \lambda^2/2). \quad (23)$$

4. Bestimmen Sie die Eigenwerte und Eigenzustände von H exakt. Vergleichen Sie diese Resultate mit Ihrer Störungsrechnung der vorherigen Aufgabe.

LÖSUNG: Matrixdarstellung von \hat{H} :

$$\hat{H} = -\mu B \begin{pmatrix} 1 & \lambda \\ \lambda & -1 \end{pmatrix} \quad (24)$$

Lösen des Eigenwertproblems gibt für die Eigenwerte:

$$E_{\pm} = \pm\mu B \sqrt{1 + \lambda^2} \approx \pm\mu B \left(1 + \frac{\lambda^2}{2} - \frac{\lambda^4}{8} + \mathcal{O}(\lambda^6) \right). \quad (25)$$

Eigenzustände:

$$|\chi_{\pm}\rangle \propto \begin{pmatrix} 1 \pm \sqrt{1 + \lambda^2} \\ \lambda \end{pmatrix}. \quad (26)$$

Aufgabe H45: Spin-Bahn-Wechselwirkung

Betrachten Sie den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \alpha \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \quad (27)$$

mit Bahndrehimpuls $\hat{\mathbf{L}}$, Spin $\hat{\mathbf{S}}$ und zugehörigen Quantenzahlen l und S .

1. Berechnen Sie $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} |(lS)JJ_z\rangle$.

LÖSUNG:

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{L}}^2 + \hat{\mathbf{S}}^2 + 2\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (28)$$

$$\Rightarrow \alpha \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} |(lS)JJ_z\rangle = \alpha \frac{(\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2)}{2} |(lS)JJ_z\rangle \quad (29)$$

$$= \frac{\alpha \hbar^2}{2} (J(J+1) - l(l+1) - S(S+1)) |(lS)JJ_z\rangle. \quad (30)$$

2. Nehmen Sie an, dass $l \geq S$, und berechnen Sie das Spektrum von \hat{H} .

LÖSUNG:

$$\langle (lS)JJ_z | \hat{H} | (l'S')J'J'_z \rangle = \frac{\alpha}{2} \langle (lS)JJ_z | (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2) | (l'S')J'J'_z \rangle \quad (31)$$

$$= \frac{\alpha \hbar^2}{2} \langle (lS)JJ_z | (J(J+1) - l(l+1) - S(S+1)) | (l'S')J'J'_z \rangle \quad (32)$$

$$= \frac{\alpha \hbar^2}{2} (J(J+1) - l(l+1) - S(S+1)) \delta_{ll'} \delta_{SS'} \delta_{JJ'} \delta_{J_z J'_z} \quad (33)$$

$$\equiv E_{lSJJ_z} \delta_{ll'} \delta_{SS'} \delta_{JJ'} \delta_{J_z J'_z}. \quad (34)$$

Unter der Annahme $l \geq S$ sowie $l = l'$, $S = S'$, $J = J'$, $J_z = J'_z$ gilt

$$(J(J+1) - l(l+1) - S(S+1)) \leq (J(J+1) - S(S+1) - S(S+1)) = (J(J+1) - 2S(S+1)), \quad (35)$$

wobei

$$|l - S| \leq |J| \leq |l + S|. \quad (36)$$

3. Was ist die Grundzustandsenergie für $\alpha > 0$ und für $\alpha < 0$?

LÖSUNG: Um nun die Grundzustandsenergie zu berechnen, betrachtet man die Energien E_{lS} zu festen J , $J - 1$ und l , S zum Hamiltonoperator.

$$E_{lS}(J) - E_{lS}(J - 1) = \frac{\alpha \hbar^2}{2} (J(J + 1) - (J - 1)J) = \frac{\alpha \hbar^2}{2} 2J = \alpha \hbar^2 J. \quad (37)$$

Ist nun $\alpha > 0$, dann liegen Zustände mit $J - 1$ tiefer als Zustände mit J und der tiefste Zustand (Grundzustand) hat $J = |l - S|$. Für $\alpha < 0$ hat der energetisch tiefste Zustand $J = l + S$. Einsetzen ergibt jeweils die Grundzustandsenergie.

4. Berechnen Sie $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} |lm\rangle |Sm_s\rangle$.

LÖSUNG: Wir haben am Anfang der Aufgabe die Eigenzustände des Hamiltonoperators berechnet, es sind die zu J, J_z gekoppelten Zustände. Die oben angegebene Eigenwertrelation kann durch Einschieben einer 1 in der Eigenbasis des Hamiltonians angewendet werden:

$$\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} |lm\rangle |Sm_s\rangle = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} \sum_{l', S', J, J_z} |(l' S') J J_z\rangle \langle (l' S') J J_z | lm\rangle |Sm_s\rangle \quad (38)$$

$$= \sum_{J, J_z} C_{lmSm_s}^{J, J_z} \frac{E_{lSJJ_z}}{\alpha} |(l' S') J J_z\rangle. \quad (39)$$

Dabei sind die $C_{lmSm_s}^{J, J_z}$ die Clebsch-Gordan-Koeffizienten.