Die Aufgaben entsprechen leicht abgeändert einer Klausur über Quantenmechanik Teil II von Prof. Dr. Nils Schopohl, Uni Tübingen. Die Lösungen wurden selbst erarbeitet und müssen somit nicht unbedingt korrekt sein.

Hanno Rein - Juli 2005
http://hanno-rein.de

Aufgabe 1

Wie ändern sich die Eigenfunktionen $Y_{l,m}(\vartheta,\varphi)$ des Bahndrehimpulsoperators $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ bei einer Inversion am Ursprung: $\vec{r} \to -\vec{r}$ für l gerade bzw. ungerade?

Lösung:
In Kugelkoordinaten lässt sich die Inversion schreiben als

$$(r,\vartheta,\varphi) \to (r,\pi-\vartheta,\varphi+\pi)$$

Die Eigenfunktionen des Bahndrehimpulsoperators sind

$$Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,P_l^m(\cos\vartheta)\,e^{im\varphi}$$

Bei der Inversion ist somit

$$\begin{aligned} & Y_{l,m}(\pi-\vartheta,\varphi+\pi) \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,P_l^m(-\cos\vartheta)\,e^{im\varphi}\,e^{im\pi} \\ &= \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,P_l^m(-\cos\vartheta)\,e^{im\varphi}\,(-1)^m \end{aligned}$$

Für die zugeordneten Legendrepolynome ist nach Definition

$$\begin{aligned} P_l^m(-\cos\vartheta) &= \frac{(-1)^m}{2^l\,l!}(1-(-\cos\vartheta)^2)^{\frac{m}{2}} \\ &\quad \cdot(\partial_{(-\cos\vartheta)})^{l+m}((-\cos\vartheta)^2-1)^l \\ &= \frac{(-1)^m}{2^l\,l!}(1-\cos^2\vartheta)^{\frac{m}{2}} \\ &\quad \cdot(-1)^{l+m}(\partial_{(\cos\vartheta)})^{l+m}(\cos^2\vartheta-1)^l \\ &= (-1)^{l+m}P_l^m(\cos\vartheta) \end{aligned}$$

Somit ist

$$\begin{aligned} Y_{l,m}(\pi-\vartheta,\varphi+\pi) &= (-1)^{l+m}(-1)^m\,Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) \\ &= (-1)^l\,Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) \end{aligned}$$

Aufgabe 2

Jemand behauptet, dass ein Operator $\hat{A}$, der mit den zwei Komponenten J_x und J_y des Drehimpulsoperators vertauscht, auch mit der Komponente J_z vertauschen muss. Ist das richtig?

Lösung:
Die Komponente J_z lässt sich schreiben als

$$J_z = \frac{-i}{\hbar}[J_x,J_y]$$

Der Kommutator zwischen $\hat{A}$ und J_z ist

$$\begin{aligned} [\hat{A},J_z] &= [\hat{A},\frac{-i}{\hbar}[J_x,J_y]] \\ &= \hat{A}\,\frac{-i}{\hbar}[J_x,J_y] - \frac{-i}{\hbar}[J_x,J_y]\,\hat{A} \\ &= \frac{-i}{\hbar}\left(\hat{A}J_xJ_y - \hat{A}J_yJ_x - J_xJ_y\hat{A} + J_yJ_x\hat{A}\right) \\ &= \frac{-i}{\hbar}\left(J_xJ_y\hat{A} - J_yJ_x\hat{A} - J_xJ_y\hat{A} + J_yJ_x\hat{A}\right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Die Aussage ist somit richtig.

Aufgabe 3

Der Hamiltonoperator $\hat{H}_C = C_\parallel \hat{J}_z^2 + C_\perp(\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2)$ spielt in der Festkörperphysik beim sogenannten Kristallfeldeffekt eine Rolle. Bestimmen Sie die zugehörigen Eigenwerte und Eigenzustände von $\hat{H}_C$!

Lösung:
Durch Umschreiben des Hamiltonoperators kommt man auf

$$\begin{aligned} \hat{H}_C &= C_\parallel \hat{J}_z^2 + C_\perp\left(\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2\right) \\ &= \left(C_\parallel - C_\perp\right)\hat{J}_z^2 + C_\perp\,\hat{J}^2 \end{aligned}$$

Somit sind die Eigenfunktionen Kugelflächenfunktionen

$$\begin{aligned} & \hat{H}_C\,Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \\ &= \hbar^2\left[C_\perp\,l\,(l+1) + \left(C_\parallel - C_\perp\right)m^2\right]\,Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \end{aligned}$$

und die zugehörigen Eigenwerte lauten

$$E_{lm} = \hbar^2\left[C_\perp\,l\,(l+1) + \left(C_\parallel - C_\perp\right)m^2\right]$$

Aufgabe 4

Welcher Zusammenhang besteht zwischen magnetischem Moment $\vec{M}$ und Spinoperator $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ des Elektrons?

Wie lautet der Hamiltonoperator eines Elektrons im äußeren Magnetfeld $\vec{B}$ wenn zusätzlich zum Spin die Ladung berücksichtig wird?

Lösung:
Das magnetische Moment $\vec{M}$ ist

$$\vec{M} = g\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{S} = 2\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{S}.$$

Der Hamiltonoperator lautet

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\mu_B}{\hbar}(\vec{L}\vec{B} + 2\vec{S}\vec{B}) + \frac{e^2}{m_e^2c^2a_0^3}\vec{L}\vec{S}$$

Aufgabe 5

a) Drücken Sie die Operatoren $\hat{J}_+\hat{J}_-$ und $\hat{J}_-\hat{J}_+$ durch $\hat{J}_z$ und $\hat{J}^2$ aus!

b) Drücken Sie den Operator $\vec{L}\cdot\vec{S}$ durch $\hat{L}^2, \hat{S}^2$ und $\hat{J}^2$ aus!

Lösung:
a) Nach Definition und der allgemeinen Drehimpulsvertauschungsrelation $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k$ ist

$$\begin{aligned}
\hat{J}_+\hat{J}_- &= \left(\hat{J}_x + i\hat{J}_y\right)\left(\hat{J}_x - i\hat{J}_y\right) \\
&= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 - i\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] \\
&= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z^2 - i\left[\hat{J}_x, \hat{J}_y\right] \\
&= \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z \\
&= \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar\hat{J}_z \\
\hat{J}_-\hat{J}_+ &= \left(\hat{J}_x - i\hat{J}_y\right)\left(\hat{J}_x - i\hat{J}_y\right) \\
&= \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar\hat{J}_z
\end{aligned}$$

b) Berechne $\hat{J}^2$:

$$\hat{J}^2 = \left(\hat{L} + \hat{S}\right)^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\left(\vec{L}\cdot\vec{S}\right)$$

Somit ist

$$\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}\left(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2\right)$$

Aufgabe 6

Ein Elektron im Wasserstoffatom befindet sich im Eigenzustand $|nLL_zS_z\rangle$ zum Energieeigenwert E_n. Wie ändert sich in erster Ordnung Störungsrechnung das Spektrum, wenn ein konstantes Magnetfeld B in z-Richtung angelegt wird (keine Spin-Bahnwechselwirkung, keine diamagnetischen Effekte)?

Lösung:
Der Hamiltonoperator ist

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \frac{\mu_B}{\hbar}B_z(\vec{L}_z + 2\vec{S}_z).$$

In erster Ordnung Störungsrechnung gilt für die Energieeigenwerte

$$\begin{aligned}
E_{nL_zS_z} &= E_n + \frac{\mu_B}{\hbar}B_z\,\langle\vec{L}_z + 2\vec{S}_z\rangle_{nLL_zS_z} \\
&= E_n + \frac{\mu_B}{\hbar}B_z(L_z + 2S_z)
\end{aligned}$$

Es gibt also eine Aufspaltung des Spektrums im Magnetfeld.

Aufgabe 7

Berechnen Sie die Kommutatoren

$$\text{a)}\ \left[\hat{b}^+, \hat{b}^n\right]_- \qquad \text{b)}\ \left[\hat{b}, \left(\hat{b}^+\right)^n\right]_-,$$

wobei gilt $[\hat{b}, \hat{b}^+]_- = \hat{1}$.

Lösung:
a) Nehme an $[b^+, b^n] = -n\cdot b^{n-1}$. Beweis durch Induktion.

Induktionsanfang:

$$n = 1: \quad [b^+, b] = b^+b - bb^+ = -1 \quad \Rightarrow \text{wahr}$$

Induktionsschritt:

$$\begin{aligned}
[b^+, b^{n+1}] &= b^+b^nb - b^nbb^+ \\
&= b^+b^nb - b^n - b^nb^+b \\
&= (b^+b^n - b^nb^+)b - b^n \\
&= [b^+, b^n]b - b^n \\
&= -nb^{n-1}b - b^n \\
&= -(n+1)b^n
\end{aligned}$$

Somit gilt die Aussage für alle n.

b) Nehme an $[b, (b^+)^n] = n\cdot(b^+)^{n-1}$. Beweis durch Induktion.

Induktionsanfang:

$$n = 1: \quad [b, b^+] = bb^+ - b^+b = 1 \quad \Rightarrow \text{wahr}$$

Induktionsschritt:

$$\begin{aligned}
[b, (b^+)^{n+1}] &= b(b^+)^nb^+ - (b^+)^nb^+b \\
&= b(b^+)^nb^+ + (b^+)^n - (b^+)^nbb^+ \\
&= [b, (b^+)^n]b^+ + (b^+)^n \\
&= n\cdot(b^+)^{n-1}b^+ + (b^+)^n \\
&= (n+1)(b^+)^n
\end{aligned}$$

Somit gilt die Aussage für alle n.

Aufgabe 8

Proton p und Neutron n sind Fermionen, die jeweils Spin $\frac{1}{2}$ tragen. Konstruieren Sie die möglichen Eigenzustände zum Gesamtspin $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}(\vec{\sigma}^{(n)} + \vec{\sigma}^{(p)})$ von Proton und Neutron im Atomkern des Deuterons.

Lösung:
Die Eigenzustände zu $\vec{S}^{(n)} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}^{(n)}$ sind

$$|1/2, 1/2\rangle_{(n)}, \qquad |1/2, -1/2\rangle_{(n)}$$

sowie zu $\vec{S}^{(p)} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}^{(p)}$

$$|1/2, 1/2\rangle_{(p)}, \qquad |1/2, -1/2\rangle_{(p)}.$$

Die beiden Quantenzahlen bezeichnen jeweils den Gesammtspin, sowie die Projektion auf die z-Achse. Die Basis des neuen Zustandraumes besteht aus den vier möglichen Kombinationen obiger Zustände

$$\begin{aligned} |1/2, 1/2\rangle_{(n)} &\otimes |1/2, 1/2\rangle_{(p)}, \\ |1/2, 1/2\rangle_{(n)} &\otimes |1/2, -1/2\rangle_{(p)}, \\ |1/2, -1/2\rangle_{(n)} &\otimes |1/2, 1/2\rangle_{(p)}, \\ |1/2, -1/2\rangle_{(n)} &\otimes |1/2, -1/2\rangle_{(p)} \end{aligned}$$

Die Eigenzustände zum Operator $\vec{S}$ mit maximaler und minimaler Quantenzahl lassen sich sofort ablesen:

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |1/2, 1/2\rangle_{(n)} \otimes |1/2, 1/2\rangle_{(p)} \\ |1, -1\rangle &= |1/2, -1/2\rangle_{(n)} \otimes |1/2, -1/2\rangle_{(p)}. \end{aligned}$$

Durch Anwenden des Kletteroperators $\hat{S}^-$ erhällt man mit Hilfe der Relation

$$\hat{S}^{\pm}|S, S_z\rangle = \hbar\sqrt{S(S+1) - S_z(S_z \pm 1)}\,|S, S_z - 1\rangle$$

sowie $\hat{S}^- = \hat{S}^{(n)-} + \hat{S}^{(p)-}$ die Gleichung

$$\begin{aligned} & \hat{S}^-|1, 1\rangle = \sqrt{2}\,|1, 0\rangle \\ = & \left(\hat{S}^{(n)-} + \hat{S}^{(p)-}\right)\,|1/2, 1/2\rangle_{(n)} \otimes |1/2, 1/2\rangle_{(p)} \\ = & \left(\hat{S}^{(n)-}|1/2, 1/2\rangle_{(n)}\right) \otimes |1/2, 1/2\rangle_{(p)} \\ & +|1/2, 1/2\rangle_{(n)} \otimes \left(\hat{S}^{(p)-}|1/2, 1/2\rangle_{(p)}\right) \\ = & |1/2, -1/2\rangle_{(n)} \otimes |1/2, 1/2\rangle_{(p)} \\ & +|1/2, 1/2\rangle_{(n)} \otimes |1/2, -1/2\rangle_{(p)}. \end{aligned}$$

Somit ist ein weiterer Eigenzustand von $\hat{S}$

$$\begin{aligned} |1, 0\rangle = & \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|1/2, -1/2\rangle_{(n)} \otimes |1/2, 1/2\rangle_{(p)} \\ & +|1/2, 1/2\rangle_{(n)} \otimes |1/2, -1/2\rangle_{(p)}\Big). \end{aligned}$$

Der letzte noch zu bestimmende Zustand ist $|0, 0\rangle$. Er ist eine Linearkombination der Form

$$\begin{aligned} |0, 0\rangle = & c_1\,|1/2, -1/2\rangle_{(n)} \otimes |1/2, 1/2\rangle_{(p)} \\ & + c_2\,|1/2, 1/2\rangle_{(n)} \otimes |1/2, -1/2\rangle_{(p)}. \end{aligned}$$

Auf Grund der Normierung muss $c_1^2 + c_2^2 = 1$ gelten. Außerdem muss der Zustand $|0, 0\rangle$ orthogonal zu $|1, 0\rangle$ sein. Daraus ergibt sich der letzte Zustand

$$\begin{aligned} |0, 0\rangle = & \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|1/2, -1/2\rangle_{(n)} \otimes |1/2, 1/2\rangle_{(p)} \\ & -|1/2, 1/2\rangle_{(n)} \otimes |1/2, -1/2\rangle_{(p)}\Big). \end{aligned}$$

Aufgabe 9

Ein Teilchen der Masse m bewegt sich in der Ebene $z = 0$ und wird durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}(\hat{x}^2 + \hat{y}^2) + \lambda \cdot \hat{x}^2 \cdot \hat{y}^2$$

beschrieben.

a) Berechnen Sie für den Spezialfall $\lambda = 0$ mit Hilfe der in der Vorlesung eingeführten Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren drei Eigenzustände niedrigster Energie!

b) Berechnen Sie in erster Ordnung Störungsrechnung für kleine Werte des Parameters λ die entsprechende Änderung der zugeordneten Energieeigenwerte!

Lösung:

a) Die Eigenvektoren des harmonischen Oszillators in einer Dimension seien $|\psi_n\rangle$. Dann ist

$$\begin{aligned} \hat{H}|\psi_{n_x,n_y}\rangle &= (\hat{H}_x + \hat{H}_y)|\psi_{n_x,n_y}\rangle \\ &= (n_x + n_y + 1)|\psi_{n_x,n_y}\rangle \end{aligned}$$

mit

$$|\psi_{n_x,n_y}\rangle = |\psi_{n_x}\rangle\,|\psi_{n_y}\rangle.$$

Die zugehörigen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren sind

$$\begin{aligned} a_x &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_x \\ a_x^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_x \\ a_y &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{y} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_y \\ a_y^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{y} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_y \end{aligned}$$

Im eindimensionalen Fall ist die Wellenfunktion im Grundzustand

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}.$$

Im zweidimensionalen Fall ergibt sich somit

$$\begin{aligned} \psi_{0,0}(x, y) &= \psi_0(x) \cdot \psi_0(y) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}(x^2+y^2)}. \end{aligned}$$

Durch Anwenden der Operatoren $a_x^\dagger$ und $a_y^\dagger$ ergiben sich die die beiden Zustände mit nächst höherer Energie

$$\begin{aligned} a_x^\dagger\psi_{0,0}(x, y) &= \sqrt{0+1}\psi_{1,0}(x, y) \\ &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_x\right)\psi_{0,0}(x, y) \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\partial_x\right)\psi_{0,0}(x,y) \\
&= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}\frac{m\omega}{\pi\hbar}}xe^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}(x^2+y^2)} \\
&\quad -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\frac{(-x)m\omega}{\hbar}e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}(x^2+y^2)} \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}\frac{m\omega}{\hbar}}\,xe^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}(x^2+y^2)} \\
a_y^\dagger\psi_{0,0}(x,y) &= \sqrt{0+1}\psi_{0,1}(x,y) \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}\frac{m\omega}{\hbar}}\,ye^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}(x^2+y^2)}
\end{aligned}
$$

b) Die Operatoren $\hat{x}^2$, $\hat{y}^2$ lassen sich mit Hilfer der Kletteroperatoren ausdrücken

$$
\begin{aligned}
\hat{x}^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega}(a_x^\dagger a_x^\dagger + a_x^\dagger a_x + a_x a_x^\dagger + a_x a_x) \\
\hat{y}^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega}(a_y^\dagger a_y^\dagger + a_y^\dagger a_y + a_y a_y^\dagger + a_y a_y)
\end{aligned}
$$

Die Änderung der Energieeigenwerte ist in erster Ordnung Störungsrechnung

$$
\begin{aligned}
\Delta E &= \lambda\,\langle \hat{x}^2 \cdot \hat{y}^2 \rangle_\psi \\
&= \lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \langle (a_x^\dagger a_x + a_x a_x^\dagger)(a_y^\dagger a_y + a_y a_y^\dagger)\rangle_\psi \\
&= \lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (n_x + n_x + 1)(n_y + n_y + 1) \\
&= \lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (2n_x + 2n_y + 4n_y n_x + 1)
\end{aligned}
$$

Aufgabe 10

a) Berechnen Sie mit Hilfe des Hellman-Feynman Theorems den Erwartungswert der kinetischen Energie und den Erwartungswert der potentiellen Energie in den Eigenzuständen des Wasserstoffatoms!

b) Wie groß ist die Summe beider Erwartungswerte?

Lösung:
Der Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms ist

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{kZe^2}{|\vec{r}|} = \hat{H}_{kin} + \hat{H}_{pot}.$$

Der zugehörige Energieeigenwert ist

$$E_n = -\frac{1}{n^2}\frac{k^2Z^2e^2m}{2\hbar}.$$

Nun berechnet man folgende Ableitungen

$$
\begin{aligned}
m\partial_m \hat{H} &= -\hat{H}_{kin} \\
m\partial_m E_n &= E_n \\
Z\partial_Z \hat{H} &= \hat{H}_{pot} \\
Z\partial_m E_n &= 2\cdot E_n
\end{aligned}
$$

Mit dem Hellman-Feynman Theorem folgt nun

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{H}_{kin}\rangle_{n,l} &= -E_n \\
\langle \hat{H}_{pot}\rangle_{n,l} &= 2\cdot E_n.
\end{aligned}
$$

Die Summe der beiden Erwartungswerte ist

$$\langle \hat{H}_{kin}\rangle_{n,l} + \langle \hat{H}_{pot}\rangle_{n,l} = -E_n + 2E_n = E_n$$