Quantenmechanik I SS 11

PROF. U. NIERSTE
DR. M. WIEBUSCH

Übungsblatt 10
Abgabe 24.06.2011
Besprechung 29.06.2011

Name: Matrikel-Nr: Gruppe:

(Bitte Ausfüllen und an die Lösung heften.)

Aufgabe 18: Skalar- und Vektor-Operatoren (8 Punkte)

Aus der Vorlesung wissen Sie, dass Drehungen des Koordinatensystems im Raum der Zustände (Kets) dargestellt werden durch den Operator $e^{i\boldsymbol{\phi}\cdot\boldsymbol{L}/\hbar}$:

$$|\psi\rangle \underset{\text{Rotation } \boldsymbol{\phi}}{\rightarrow} |\psi'\rangle = e^{i\boldsymbol{\phi}\cdot\boldsymbol{J}/\hbar}|\psi\rangle \quad . \tag{1}$$

Dabei ist $|\boldsymbol{\phi}|$ der Rotationswinkel, $\hat{\boldsymbol{\phi}} = \boldsymbol{\phi}/|\boldsymbol{\phi}|$ die Rotationsachse und $\boldsymbol{J}$ der (Gesamt-) Drehimpulsoperator.

a) Operatoren A, deren Matrixelemente invariant unter Rotationen sind, also $\langle\chi'|A|\psi'\rangle = \langle\chi|A|\psi\rangle$ erfüllen, bezeichnet man als *skalare Operatoren.* Dabei sind $|\psi\rangle$ und $|\chi\rangle$ beliebige Zustände und $|\psi'\rangle$ und $|\chi'\rangle$ die entsprechenden rotierten Zustände. Zeigen Sie, dass $[J_i, A] = 0$ ist. (1 Punkt)

b) Als *Vektor-Operatoren* bezeichnet man Operatoren $\boldsymbol{B} = (B_1, B_2, B_3)$, deren Matrixelemente unter Rotationen wie ein Vektor transformieren:

$$\langle\chi'|B_i|\psi'\rangle = \sum_j [R(\boldsymbol{\phi})]_{ij}\langle\chi|B_j|\psi\rangle \quad .$$

wobei $R(\boldsymbol{\phi})$ die Rotationsmatrix einer Drehung um den Winkel $|\boldsymbol{\phi}|$ und die Achse $\hat{\boldsymbol{\phi}}$ ist. Zeigen Sie:

$$[J_i, B_j] = i\hbar\sum_k \varepsilon_{ijk}B_k \quad .$$

(2 Punkte)

c) Es sei A ein skalarer Operator und $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{C}$ Vektor-Operatoren. Zeigen Sie, dass $\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}$ ein skalarer Operator und $\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C}$, $A\boldsymbol{B}$ und $\boldsymbol{B}A$ Vektor-Operatoren sind. (2 Punkte)

d) Zeigen Sie, dass der Hamilton-Operator eines Teilchens in einem rotationssymmetrischen Potential ein skalarer Operator ist. Was folgt daraus für den Drehimpulsoperator $\boldsymbol{J}$? (3 Punkte)

Aufgabe 19: Algebraische Bestimmung des Wasserstoff-Spektrums (12 Punkte)

Der Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms ist

$$H = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2m} - \gamma R^{-1} \quad , \quad \gamma = \hbar c\alpha \quad ,$$

wobei $\alpha \simeq 1/137$ die Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante ist. Der Operator R^{-1} ist skalar im Sinne von Aufgabe 18. Er ist in der Ortsdarstellung definiert durch $R^{-1}\psi(\boldsymbol{x}) = \psi(\boldsymbol{x})/|\boldsymbol{x}|$. Wir vernachlässigen in dieser Aufgabe den Spin, so dass $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L}$ ist.

Das Punktspektrum des Wasserstoffatoms wurde 1926 durch W. Pauli auf algebraischem Weg bestimmt. Die Methode nutzt den *Runge-Lenz-Vektor*

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{L} - \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{P}) - \gamma \boldsymbol{X} R^{-1} \quad .$$

$\boldsymbol{A}$ ist eine Erhaltungsgröße, $[H, \boldsymbol{A}] = 0$, und erfüllt

$$\boldsymbol{A}^2 = \frac{2}{m}\, H\,(\boldsymbol{L}^2 + \hbar^2) + \gamma^2 \quad , \quad [A_i, A_j] = -\frac{2i\hbar}{m}\, H \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k \quad .$$

Diese Gleichungen, die man aus den Kommutatorrelationen von P, X und L herleiten kann, dürfen Sie ohne Beweis verwenden.

a) Zeigen Sie, dass $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{L} = 0$ ist.
Hinweise: Für Operatoren B_i, C_i $(i = 1, 2, 3)$ ist i.a. $\sum_{ijk} \varepsilon_{ijk} B_i C_j C_k \neq 0$ und $\sum_{ijk} \varepsilon_{ijk} C_i B_j C_k \neq 0$. Zeigen Sie $\sum_{jk} \varepsilon_{ijk} C_j C_k = \frac{1}{2}\sum_{jk} \varepsilon_{ijk} [C_j, C_k]$ und verwenden Sie die in Aufgabe 17a gezeigten Beziehungen. (3 Punkte)

b) Die Bindungszustände des Wasserstoffatoms seien $|n\rangle$ mit Energieeigenwerten $E_n < 0$. Wir definieren auf dem Teilraum der Bindungszustände den Operator $(-H)^{-1/2} = \sum_n (-E_n)^{-1/2} |n\rangle\langle n|$ und $\boldsymbol{A}' = \sqrt{m/2}(-H)^{-1/2}\boldsymbol{A}$. Zeigen Sie:

$$[L_i, A'_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} A'_k \quad , \quad [A'_i, A'_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k \qquad (2)$$

Hinweis: Benutzen Sie Aufgabe 18 für die erste Gleichung. (2 Punkte)

c) Zeigen Sie, dass $\boldsymbol{I} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{A}')$ und $\boldsymbol{K} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{L} - \boldsymbol{A}')$ die Relationen

$$[I_i, I_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} I_k \quad , \quad [K_i, K_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} K_k \quad , \quad [I_j, K_k] = 0 \qquad (3)$$

erfüllen. (2 Punkte)

d) Begründen Sie, warum die Eigenwerte von $\boldsymbol{I}^2$ gleich $a(a+1)\hbar^2$ mit $a = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$ und die von $\boldsymbol{K}^2$ gleich $k(k+1)\hbar^2$ mit $k = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots$ sind. (1 Punkt)

e) Zeigen Sie, dass $\boldsymbol{K}^2 = \boldsymbol{I}^2 = \frac{1}{4}(\boldsymbol{L}^2 + \boldsymbol{A}'^2)$ ist, was mithin $a = k$ impliziert. (2 Punkte)

f) Zeigen Sie

$$H = -\frac{m\gamma^2}{2}[4\boldsymbol{K}^2 + \hbar^2]^{-1} \quad .$$

Definieren Sie die Hauptquantenzahl $n = 2k + 1 = 1, 2, 3, \ldots$ und bestätigen Sie die Balmer-Formel

$$E_n = -\frac{mc^2}{2}\frac{\alpha^2}{n^2} \quad .$$

Berechen Sie die Rydberg-Konstante $R_\infty = mc^2\alpha^2/2$. (Die Ruhenergie des Elektrons ist $mc^2 = 511\,\mathrm{keV}$.) (2 Punkte)