Moderne Theoretische Physik I SS 2021

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Vanessa Gall, Dr. Roland Willa

Blatt 8
Abgabe 18.06.2021

---

1. Stern-Gerlach experiment für Spin-1 Teilchen

Es sei ein Teilchen mit Spin $s = 1$

a) Nutzen Sie die Eigenbasis der Operatoren $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ und $\hat{S}_z$ [die Basisvektoren werden mit $|1, s_z\rangle$ (oder kurz nur $|s_z\rangle$) bezeichnet] um eine *Matrixdarstellung* der Operatoren $\hat{\boldsymbol{S}}^2$, $\hat{S}_\pm$ und $\hat{S}_\mu$ ($\mu \in \{x, y, z\}$) zu finden. *Hinweis:* Die Eigenwerte eines Operators stehen in dessen Eigenbasis auf der Diagonalen.

b) Bestimmen Sie den Kommutator $[\hat{S}_x, \hat{S}_y]$ und kommentieren Sie das Ergebnis.

c) Finden Sie Ausdrücke für die Eigenzustände $|\psi_{s_x}\rangle$ ($s_x \in \{-1, 0, 1\}$) von $\hat{S}_x$ als Superposition von $\hat{S}_z$-Eigenzuständen. Arbeiten Sie dabei im Matrizenraum.

d) Welche Werte kann eine Messung der z-Komponente des Spins ($\hat{S}_z$) bei dem Zustand $|\psi_1\rangle$ hervorbringen? Geben Sie auch an mit welcher Wahrscheinlichkeit jedes Messergebnis gefunden wird.

e) Welche Werte kann ein sukzessives Messen von (zuerst) $\hat{S}_z$ und (dann) $\hat{S}_x$ bei dem Zustand $|\psi_1\rangle$ hervorbringen? Geben Sie auch hierfür die jeweiligen Wahrscheinlichkeiten an. Unterscheiden Sie dabei ob Sie das Ergebnis der ersten Messung ($s_z = 1$) gesehen haben oder nicht.

Lösungsskizze:

a) Für $\hat{\boldsymbol{S}}^2$ und $\hat{S}_z$ sind die Darstellungen trivial nämlich

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2 = 2\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad \hat{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1}$$

Damit wird die Basis eindeutig festgelegt: $\{|1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle\}$ (Reihenfolge beachten!). Das in Blatt 5 gewonnene Wissen hilft uns die Leiteroperatoren zu finden mit

$$\hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad \hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \tag{2}$$

Wir verifizieren, dass $\hat{S}_\pm \hat{S}_\mp = \hat{\boldsymbol{S}}^2 - \hat{S}_z^2 \pm \hbar \hat{S}_z$ erfüllt ist. Wir finden zum Schluss

$$\hat{S}_x = \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2} = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \hat{S}_y = -i\frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2} = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

b) Wir finden $\hat{S}_x\hat{S}_y - \hat{S}_y\hat{S}_x = i\hbar\hat{S}_z$ durch explizites Ausmultiplizieren der Matrizen. Dies entspricht der Kommutatorrelation $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$.

c) Die Eigenwerte von $\hat{S}_x$ sind bekannterweise $1, 0, -1$ und man erhält

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad |\psi_0\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 0 \\ -\sqrt{2} \end{pmatrix}, \qquad \text{und} \qquad |\psi_{-1}\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

d) Die Matrix

$$\Lambda \equiv \langle s_z|\psi_{s_x}\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \tag{5}$$

führt die Basistransformation von der Eigenbasis $\hat{S}_x$ zur Basis von $\hat{S}_z$ durch. Damit ist die Wahrscheinlichkeit bei einem Zustand $|\psi_1\rangle$ einen Spin-Wert s_z zu messen gegeben durch

$$|\lambda_{1,1}|^2 = 1/4 \qquad \text{für } s_z = 1 \tag{6}$$

$$|\lambda_{0,1}|^2 = 1/2 \qquad \text{für } s_z = 0 \tag{7}$$

$$|\lambda_{-1,1}|^2 = 1/4 \qquad \text{für } s_z = -1 \tag{8}$$

e) Wird zuerst $\hat{S}_z$ gemessen und der Wert $s_z = 1$ festgestellt, so ist das System vor der zweiten Messung im Eigenzustand $|1\rangle$. Analog zur letzten Teilaufgabe kommen daher bei der zweiten Messung die (Messwerte / Wahrscheinlichkeit)-Paare

$$(s_x = 1 \;/\; w_1 = 1/4), \qquad (s_x = 0 \;/\; w_0 = 1/2), \qquad (s_x = -1 \;/\; w_{-1} = 1/4) \tag{9}$$

heraus. Dies geht auch aus der Identität $\Lambda^{-1} = \Lambda^T$ hervor.

Im zweiten Fall, kennen wir den Zustand nach der ersten Messung nicht und mšsen alle möglichen Fälle betrachten. Der Fall $s_z = 1$ wurde eben diskutiert (und tritt mit Wahrscheinlichkeit 1/4 ein). Gleiches gilt für $s_z = -1$. Hat die Messung von $\hat{S}_z$ das Ergebnis $s_z = 0$ erzeugt (was mit Wahrscheinlichkeit 1/2 passiert), erlaubt eine darauffolgende Messung von $\hat{S}_x$ nur die Werte $s_x = \pm 1$ (mit gleicher Wahrscheinlichkeit 1/2). Daraus ergeben sich dann die (Messwerte / Wahrscheinlichkeit)-Paare

$$(s_x = 1 \;/\; w_1 = 3/8), \qquad (s_x = 0 \;/\; w_0 = 1/4), \qquad (s_x = -1 \;/\; w_{-1} = 3/8) \tag{10}$$

2. Harmonischer Oszillator in 3 Dimensionen

Betrachten Sie ein Teilchen in einem dreidimensionalen harmonischen Potential $V(r) = \kappa r^2/2$. Lösen Sie das Problem vollständig (d.h. unter Angabe von allen Eigenzuständen und Eigenwerten). Bestimmen Sie zudem den Entartungsgrad jedes Energiezustandes.

Lösungsskizze: Mit $\omega = \sqrt{\kappa/m}$ kann das Problem in jede Raumrichtung individuell gelöst werden. Dies geschieht mithilfe der Auf- und Absteigeoperatoren

$$\hat{a}_\eta^\dagger = (\sqrt{2}/2)(\hat{\eta}/\eta_0 + \hat{p}_\eta/p_0) \qquad \hat{a}_\eta = (\sqrt{2}/2)(\hat{\eta}/\eta_0 - \hat{p}_\eta/p_0) \tag{11}$$

wobei $\eta_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$, $p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}$ und $\eta \in \{x, y, z, ...\}$ (wir lösen das Problem formal für beliebige Dimension d). Diese Operatoren genügen den bekannten Kommutatorrelationen, d.h. alle Kommutatoren bis auf $[\hat{a}_\eta, \hat{a}_\eta^\dagger] = 1$ verschwinden. Der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \sum_\mu \left[(\hat{p}_\mu^2/2m) + (m\omega^2\hat{\mu}^2/2)\right] \tag{12}$$

vereinfacht sich zu

$$\hat{H} = \hbar\omega \sum_\mu (\hat{a}_\mu^\dagger \hat{a}_\mu + 1/2) \tag{13}$$

und besitzt die Energieeigenzustände

$$|\{n_\mu\}\rangle \equiv \prod_\mu \frac{(\hat{a}_\mu^\dagger)^{n_\mu}}{\sqrt{n_\mu!}}|0\rangle \tag{14}$$

wobei der Grundzustand $|0\rangle = (4\pi r_0^2)^{-d/4} e^{-r^2/2r_0^2}$ (mit $r_0 = \eta_0$) eine Grundzustandsenergie $E_0 = d(\hbar\omega/2)$ besitzt.

Für den Fall $d = 3$ ist die Grundzustandsenergie $E_0 = (3/2)\hbar\sqrt{\kappa/m}$. Aufbauend auf dieser Energie gibt es Energiezustände bei ganzzahligen Vielfachen von $\hbar\sqrt{\kappa/m}$, d.h. $E_N = E_0 + (\hbar\sqrt{\kappa/m})N$ Dabei muss die Summe der Besetzungszahlen $\sum_{\mu=1}^3 n_\mu = N$ gelten. Für jede Wahl $n_z = N - M$ gibt es $M + 1$ Möglichkeiten (n_x, n_y) so zu wählen, dass $n_x + n_y = M$. Also ergibt sich der Entartungsgrad γ_N des Energieniveaus aus

$$\gamma_N = \sum_{M=0}^N (M+1) = N(N+1)/2 + (N+1) = (N+1)(N+2)/2. \tag{15}$$

Für grosse N skaliert die Entartung wie $\gamma_N \propto N^{d-1}$. Tatsächlich ist die Entartung in d Dimensionen genau

$$\gamma_N = \prod_{j=1}^{d-1} \frac{j+N}{j} = \frac{(1+N)^{(d)}}{d!}. \tag{16}$$

wobei die letzte Schreibweise das Pochhammersymbol $x^{(d)} \equiv x(x+1)(x+2)...(x+d-1)$ verwendet.

3. Zweidimensionales Zentralpotential

In dieser Aufgabe betrachten wir zweidimensionale Probleme im Zentralpotential $V(\boldsymbol{r}) = V(\rho)$, wobei $\boldsymbol{r} = (x, y) = \rho(\cos\theta, \sin\theta)$. Der Hamiltonian ist also gegeben durch

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\rho). \tag{17}$$

In Polarkoordinaten ist der Laplace-Operator gegeben durch

$$\Delta = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} \tag{18}$$

a) Drücken Sie die (aus der Ebene gerichtete) z Komponente des dreidimensionalen Drehimpulses L_z in Polarkoordinaten aus. Zeigen Sie, dass der Hamiltonian (17) geschrieben werden kann als

$$\mathcal{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) - \frac{1}{\rho^2\hbar^2}\hat{L}_z^2\right) + V(\rho) \tag{19}$$

b) Zeigen Sie, dass die Lösung $\Psi(\rho,\theta)$ geschrieben werden kann als $\Psi(\rho,\theta) = R(\rho)F_m(\theta)$. Finden Sie die Bestimmungsgleichung für $F_m(\theta)$ und lösen Sie sie. Zeigen Sie, dass m eine ganze Zahl sein muss.

c) Das Potential besitze die Form

$$V(\rho) = \begin{cases} -V_0 & \rho < a \\ 0 & \rho > a \end{cases}. \tag{20}$$

Finden Sie die gebundenen Zustände mit $-V_0 < E < 0$. Zeigen Sie, dass der Radialanteil der Gleichung

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial R}{\partial\rho} + \frac{\partial^2 R}{\partial\rho^2} - \frac{m^2}{\rho^2}R + q^2 R = 0, \tag{21}$$

genügt. Was ist q?

d) Zum Lösen des Radialanteils, führen Sie eine Koordinatentransform durch: Definieren Sie hierzu $R(\rho) = G(x)$ mit $x = q\rho$ und finden Sie die Differentialgleichung in Abgängigkeit von x und $G(x)$. Zeigen Sie, dass Sie eine Besselsche Differentialgleichung

$$x^2\frac{\partial^2 G}{\partial x^2} + x\frac{\partial G}{\partial x} + (x^2 - m^2)G = 0 \tag{22}$$

erhalten. Als Lösung dieser Differentialgleichung erhalten Sie

$$R(\rho) = \begin{cases} J_m(q\rho), & 0 < \rho < a \\ H_m^{(1)}(q\rho), & \rho > a \end{cases}. \tag{23}$$

Verwenden Sie die auf dem letzten Blatt eingeführte logarithmische Ableitung um eine formale Bedingung zur Bestimmung des Eigenenergien E_m zu erhalten.

Lösungsskizze:

a) Zunächst stellt man fest, dass die Koordinatensysteme verknüpft sind über

$$x = \rho\cos\theta \tag{24}$$

$$y = \rho\sin\theta \tag{25}$$

oder umgekehrt

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2} \tag{26}$$

$$\tan(\theta) = \frac{y}{x}. \tag{27}$$

Somit ist insbesondere

$$\frac{\partial \rho}{\partial x} = \cos\theta, \quad \frac{\partial \rho}{\partial y} = \sin\theta \tag{28}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{-\sin\theta}{\rho}, \quad \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{\cos\theta}{\rho}. \tag{29}$$

Nun können wir schreiben

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z &= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) & (30)\\
&= -i\hbar\left(x\left(\frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \rho}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \rho}\right) - y\left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \rho}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \rho}\right)\right) & (31)\\
&= -i\hbar\left(\left(x\frac{\partial \rho}{\partial y} - y\frac{\partial \rho}{\partial x}\right)\frac{\partial}{\partial \rho} + \left(x\frac{\partial \theta}{\partial y} - y\frac{\partial \theta}{\partial x}\right)\frac{\partial}{\partial \theta}\right) & (32)\\
&= -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial \theta}\right) & (33)\\
\hat{L}_z^2 &= -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. & (34)
\end{aligned}$$

Somit ist insbesondere

$$\Delta = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial \rho}\right) - \frac{1}{\rho^2\hbar^2}\hat{L}_z^2 \tag{35}$$

und wir erhalten

$$\mathcal{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial \rho}\right) - \frac{1}{\rho^2\hbar^2}\hat{L}_z^2\right) + V(\rho) \tag{36}$$

b) Mit dem Ansatz $\Psi(\rho,\theta) = R(\rho)F_m(\theta)$ erhalten wir durch Einsetzen in die Schrödingergleichung

$$\begin{aligned}
&\mathcal{H}R(\rho)F_m(\theta) = ER(\rho)F_m(\theta) & (37)\\
\Leftrightarrow &F_m(\theta)\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\right)R(\rho)\right) + R(\rho)\frac{1}{2m}\frac{1}{\rho^2}\left(\hat{L}_z^2F_m(\theta)\right) + F_m(\theta)V(\rho)R(\rho) = EF_m(\theta)R(\rho). & (38)
\end{aligned}$$

Somit finden wir eine Lösung der Gleichung mit diese Ansatz, wenn wir die Eigenwerte von $\hat{L}_z^2$ finden, also

$$\hat{L}_z^2F_m(\theta) = -\hbar^2\partial_\theta^2F_m(\theta) = A_mF_m(\theta). \tag{39}$$

Da dies eine lineare Differentialgleichung ist, finden wir durch den Ansatz $F_m(\theta) = e^{im\theta}$ einen Eigenzustand mit Eigenwert $A_m = \hbar^2m^2$. Da wir in Polarkoordinaten sind, darf θ aber nur von 0 bis 2π laufen, insbesondere also

$$\begin{aligned}
F_m(\theta) = F_m(\theta + 2\pi) \Leftrightarrow e^{im\theta} &= e^{im(\theta+2\pi)} & (40)\\
\Rightarrow e^{2\pi im} &= 1 \Leftrightarrow m \in \mathbb{Z}. & (41)
\end{aligned}$$

Somit sind die Eigenwerte von $\hat{L}_z^2$ charakterisiert durch ganze Zahlen!

c) Durch Einsetzen des Ansatzes aus der vorherigen Aufgabe und Ausnutzen der Eigenwertgleichung des Winkelanteils erhalten wir

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial R}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} - \frac{m^2}{\rho^2} R + q^2 R = 0, \tag{42}$$

wobei $q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(\rho))$ in beiden Bereichen eine Konstante ist.

d) Mit der Koordinatentransformation erhalten wir

$$\frac{\partial R(\rho)}{\partial \rho} = \frac{\partial G(x)}{\partial \rho} = \frac{\partial G(x)}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \rho} = q\frac{\partial G(x)}{\partial x}. \tag{43}$$

Durch Multiplizieren mit x^2/q^2 erhalten wir die gewünschte Form

$$x^2 \frac{\partial^2 G}{\partial x^2} + x\frac{\partial G}{\partial x} + (x^2 - m^2)G = 0. \tag{44}$$

Die normierbaren Lösungen dieser Differentialgleichungen sind Bessel- und Hankelfunktionen und führen entsprechend zum Ansatz

$$R(\rho) = \begin{cases} c_1 J_m(k\rho), & 0 < \rho < a \\ c_2 H_m^{(1)}(i\kappa\rho), & \rho > a \end{cases}, \tag{45}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)}, \quad \kappa = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E}. \tag{46}$$

Formal erhalten wir aus den Stetigkeitbedingungen in $\rho = a$

$$c_1 J_m(ka) = c_2 H_m^{(1)}(i\kappa a) \tag{47}$$

$$c_1 k \left(\frac{\partial J_m(x)}{\partial x}\right)\Bigg|_{x=ka} = c_2 i\kappa \left(\frac{\partial H_m^{(1)}(x)}{\partial x}\right)\Bigg|_{x=i\kappa a} \tag{48}$$

also für den Quotienten

$$\frac{J_m(ka)}{k\left(\frac{\partial J_m(x)}{\partial x}\right)\Big|_{x=ka}} = \frac{H_m^{(1)}(i\kappa a)}{i\kappa\left(\frac{\partial H_m^{(1)}(x)}{\partial x}\right)\Big|_{x=i\kappa a}}. \tag{49}$$

Dies bestimmt die Eigenergien E_m (die nicht analytisch bestimmbar sind). Dies ist ein Beispiel dafür, dass hier, wie in vielen Fällen, tatsächlich der zweidimensionale Fall der mathematisch involvierteste ist!