Moderne Theoretische Physik I
Grundlagen der Quantenmechanik

Blatt 10

Prof. A. Metelmann
S. Böhling, L. Orr, V. Stangier
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Abgabe bis: 07.07.2023, 14:00 Uhr

Das Übungsblatt wird in Gruppen von maximal 3 Personen bearbeitet. Die Abgabe erfolgt digital über ILIAS.

Aufgabe 1. Angular Momentum Commutation Relations (6 Punkte)

The angular momentum operator $\hat{\mathbf{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ is defined in a 3-D Cartesian coordinate system as the cross product between the position vector $\hat{\mathbf{x}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ and the momentum vector $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$, so $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$.

1. (3 Punkte) Show that the angular momentum operators obey the following commutation relation:

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k \quad \text{where} \quad \epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & \text{if } \{ijk\} = \{123\}, \{312\}, \{231\} \\ -1, & \text{if } \{ijk\} = \{132\}, \{213\}, \{321\} \\ 0, & \text{if any two indices are equal,} \end{cases} \tag{1}$$

   where we define $x = 1, y = 2$, and $z = 3$. ϵ_{ijk} is called the Levi-Civita symbol, and from the above definition we can see that it is $+1$ for an even permutation of the indices $\{ijk\}$, and -1 for an odd permutation of the indices.

2. (3 Punkte) Show that the operator $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ commutes with all of the individual components of $\hat{\mathbf{L}}$.

Lösung Aufgabe 1.

1. For this problem it is eaisest to write $(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z) = (\hat{L}_1, \hat{L}_2, \hat{L}_3)$, $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = (\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$, and $(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3)$. Using the cross-product definition we can write:

$$\hat{L}_1 = \hat{x}_2\hat{p}_3 - \hat{x}_3\hat{p}_2 \qquad \hat{L}_2 = \hat{x}_3\hat{p}_1 - \hat{x}_1\hat{p}_3 \qquad \hat{L}_3 = \hat{x}_1\hat{p}_2 - \hat{x}_2\hat{p}_1$$

   We know that for identical indices the commutator will be zero, $[\hat{L}_k, \hat{L}_k] = 0$, which just follows by the definition of the commutator.

$$[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = [\hat{x}_2\hat{p}_3 - \hat{x}_3\hat{p}_2, \hat{x}_3\hat{p}_1 - \hat{x}_1\hat{p}_3] = \hat{x}_2[\hat{p}_3, \hat{x}_3]\hat{p}_1 + [\hat{x}_3, \hat{p}_3]\hat{p}_2\hat{x}_1 = i\hbar(-\hat{x}_2\hat{p}_1 + \hat{p}_2\hat{x}_1) = i\hbar\hat{L}_3$$

   It follows from the definition of the commutator that $[\hat{L}_2, \hat{L}_1] = -[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = -i\hbar\hat{L}_3$. From here, we can either argue that because the labels $\{1, 2, 3\}$ are arbitrary, that any even permutation must give $+i\hbar$ and every odd permutation $-i\hbar$ and be done. We could also just calculate the remaining commutators explicitly:

$$[\hat{L}_2, \hat{L}_3] = i\hbar\hat{L}_1 \Rightarrow [\hat{L}_3, \hat{L}_2] = -i\hbar\hat{L}_1 \quad \text{and} \quad [\hat{L}_3, \hat{L}_1] = i\hbar\hat{L}_2 \Rightarrow [\hat{L}_1, \hat{L}_3] = -i\hbar\hat{L}_2.$$

   Putting all of these cases together, we can then write $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k$, where ϵ_{ijk} is defined above in the problem. An interesting result of these commutation relations is that $\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = i\hbar\hat{\mathbf{L}}$.

2. This question just requires use of well known commutator identities. We will work out one commutator explicitly here:

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_1] &= [\hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2, \hat{L}_1] = [\hat{L}_2^2, \hat{L}_1] + [\hat{L}_3^2, \hat{L}_1] \\
&= \hat{L}_2[\hat{L}_2, \hat{L}_1] + [\hat{L}_2, \hat{L}_1]\hat{L}_2 + \hat{L}_3[\hat{L}_3, \hat{L}_1] + [\hat{L}_3, \hat{L}_1]\hat{L}_3 \\
&= \hat{L}_2(-i\hbar\hat{L}_3) + (-i\hbar\hat{L}_3)\hat{L}_2 + \hat{L}_3(i\hbar\hat{L}_2) + (i\hbar\hat{L}_2)\hat{L}_3 \\
&= 0.
\end{aligned}$$

The other two commutators, $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_2] = 0$ and $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_3] = 0$, can be worked out in a similar manner.

Aufgabe 2. Bahndrehimpuls (6 Punkte)

1. (2 Punkte) Zeigen Sie, dass die Komponenten des Drehimpulsoperators in Kugelkoordinaten $x = r\sin\theta\cos\phi$, $y = r\sin\theta\sin\phi$ und $z = r\cos\theta$ mit $r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$ gegeben sind durch

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(-\sin\phi\partial_\theta - \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\partial_\phi\right) \tag{2}$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\phi\partial_\theta - \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\partial_\phi\right) \tag{3}$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\partial_\phi \tag{4}$$

wobei $\partial_\theta = \frac{\partial}{\partial_\theta}$ und $\partial_\phi = \frac{\partial}{\partial_\phi}$. Verwenden Sie hierfür, dass der Gradient in Kugelkoordinaten gegeben ist durch

$$\nabla = \hat{\mathbf{e}}_r\partial_r + \hat{\mathbf{e}}_\theta\frac{1}{r}\partial_\theta + \hat{\mathbf{e}}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\partial_\phi \tag{5}$$

mit den Einheitsvektoren

$$\hat{\mathbf{e}}_r = \sin\theta\cos\phi\hat{\mathbf{e}}_x + \sin\theta\sin\phi\hat{\mathbf{e}}_y + \cos\theta\hat{\mathbf{e}}_z \tag{6}$$

$$\hat{\mathbf{e}}_\theta = \cos\theta\cos\phi\hat{\mathbf{e}}_x + \cos\theta\sin\phi\hat{\mathbf{e}}_y - \sin\theta\hat{\mathbf{e}}_z \tag{7}$$

$$\hat{\mathbf{e}}_\phi = -\sin\phi\hat{\mathbf{e}}_x + \cos\phi\hat{\mathbf{e}}_y. \tag{8}$$

2. (2 Punkte) Zeigen Sie, dass die Wellenfunktion

$$\psi(r) = N(x + y + 2z)\, e^{-\frac{r^2}{a^2}} \tag{9}$$

eine Eigenfunktion des Operators $\hat{\mathbf{L}}^2$ ist, wobei

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2\left(\partial_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2 + \frac{1}{\tan\theta}\partial_\theta\right). \tag{10}$$

Die Wirkung von $\hat{\mathbf{L}}^2$ auf seine Eigenfunktionen ist gegeben durch

$$\hat{\mathbf{L}}^2\psi(\mathbf{r}) = \hbar^2 l(l+1)\psi(\mathbf{r}). \tag{11}$$

Bestimmen Sie $l \in \mathbb{N}_0$.

3. (2 Punkte) Wie lautet der Erwartungswert $\langle\hat{L}_z\rangle$ für diese Wellenfunktion? Drücken Sie den winkelabhängigen Teil der Wellenfunktion durch Kugelflächenfunktionen aus. Die Wirkung von $\hat{L}_z$ auf Kugelflächenfunktionen ist dann gegeben durch

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta,\phi) = \hbar m Y_l^m(\theta,\phi) \tag{12}$$

Lösung Aufgabe 2.

1. Die Einheitsvektoren spannen ein rechtshändiges orthogonales Koordinatensystem auf. Somit gilt:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{e}}_r \times \hat{\mathbf{e}}_\theta &= \hat{\mathbf{e}}_\phi \\ \hat{\mathbf{e}}_\theta \times \hat{\mathbf{e}}_\phi &= \hat{\mathbf{e}}_r \\ \hat{\mathbf{e}}_\phi \times \hat{\mathbf{e}}_r &= \hat{\mathbf{e}}_\theta\end{aligned}$$

   Für den Drehimpuls gilt damit

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}} &= \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \\ &= \frac{\hbar}{i}\hat{\mathbf{r}} \times \nabla \\ &= \frac{\hbar}{i} r\hat{\mathbf{e}}_r \times \left(\hat{\mathbf{e}}_r \partial_r + \hat{\mathbf{e}}_\theta \frac{1}{r}\partial_\theta + \hat{\mathbf{e}}_\phi \frac{1}{r\sin\theta}\partial_\phi\right) \\ &= \frac{\hbar}{i}\left(\partial_\theta \hat{\mathbf{e}}_\phi - \frac{\partial_\phi}{\sin\theta}\hat{\mathbf{e}}_\theta\right) \\ &= \frac{\hbar}{i}\left[\left(-\sin\phi\partial_\theta - \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\partial_\phi\right)\hat{\mathbf{e}}_x \left(\cos\phi\partial_\theta - \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\partial_\phi\right)\hat{\mathbf{e}}_y + \partial_\phi \hat{\mathbf{e}}_z\right].\end{aligned}$$

2. Die Wellenfunktion ausgedrückt in Kugelkoordinaten lautet

$$\psi\,(r,\theta,\phi) = Nr(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta)e^{-\frac{r^2}{a^2}}.$$

   $\hat{\mathbf{L}}^2$ auf den winkelabhängigen Teil von $\psi(r)$ angewandt ist

$$\begin{aligned}\partial_\theta^2(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta) &= -(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta) \\ \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta) &= -\frac{\cos\phi + \sin\phi}{\sin\theta} \\ \frac{1}{\tan\theta}\partial_\theta(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta) &= -\left(-\frac{\cos^2\theta}{\sin\theta}\cos\phi - \frac{\cos^2\theta}{\sin\theta}\sin\phi + 2\cos\theta\right)\end{aligned}$$

   bzw. auf $\psi(r)$

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}^2\psi(r,\theta,\phi) &= \hat{\mathbf{L}}^2 Nr(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta)e^{-\frac{r^2}{a^2}} \\ &= 2\hbar^2 Nr(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 2\cos\theta)e^{-\frac{r^2}{a^2}}.\end{aligned}$$

   Somit ist $l(l+1) = 2$ und damit $l = 1$.

3. Mit einer passenden Tabelle (z.B. Wikipedia, etc) findet man, dass sich die trigonometrischen Funktionen durch Kugelflächenfunktionen mit $l = 1$ ausdrücken lassen

$$\begin{aligned}\sin\theta\cos\phi &= \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^{-1}(\theta,\phi) - Y_1^1(\theta,\phi)\right) \\ \sin\theta\sin\phi &= i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left(Y_1^{-1}(\theta,\phi) + Y_1^1(\theta,\phi)\right) \\ \cos\theta &= 2\sqrt{\frac{\pi}{3}}Y_1^0(\theta,\phi).\end{aligned}$$

   Somit findet man für die Wellenfunktion

$$\psi(r,\theta,\phi) = Nr\left(\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[(1+i)Y_1^{-1}(\theta,\phi) + (i-1)Y_1^1(\theta,\phi)\right] + 4\sqrt{\frac{\pi}{3}}Y_1^0(\theta,\phi)\right)e^{-\frac{r^2}{a^2}}.$$

Den Erwartungswert $\langle \hat{L}_z \rangle$ bestimmt sich mit $\hat{L}_z Y_l^m(\theta,\phi) = \hbar m Y_l^m(\theta,\phi)$ und der Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen zu

$$\begin{aligned}\langle \hat{L}_z \rangle &= \int r^2 dr \int d\Omega \psi^*(r,\theta,\phi)\hat{L}_z\psi(r,\theta,\phi) \\ &= \hbar \int r^2 dr \int d\Omega \left(\frac{2\pi}{3}(-|1+i||Y_1^{-1}(\theta,\phi)|^2 + |i-1|^2|Y_1^1(\theta,\phi)|^2) \right) rNe^{-\frac{r^2}{a^2}} \\ &= 0.\end{aligned}$$

Aufgabe 3. (6 Punkte)

In der Vorlesung haben Sie den allgemeinen Drehimpulsoperator kennengelernt. Sie haben dort auch Leiteroperatoren $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}y$ definiert, die uns ähnlich wie Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren einen Zustand höher oder niedriger bringen.

1. (2 Punkte) Berechnen Sie die Varianz der Komponenten $\hat{J}_x$ und $\hat{J}_y$ für einen Zustand $|jm\rangle$. In welchem Zustand $|jm\rangle$ mit einem gegebenen j besitzen diese Varianzen ihr Minimum und wie groß ist diese minimale Varianz?

2. (4 Punkte) Beweisen Sie durch vollständige Induktion:

$$\text{(a)} \qquad |j\,m\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}} \left(\frac{1}{\hbar}\hat{J}_-\right)^{j-m} |j\,j\rangle \tag{13}$$

$$\text{(b)} \qquad |j\,m\rangle = \sqrt{\frac{(j-m)!}{(2j)!(j+m)!}} \left(\frac{1}{\hbar}\hat{J}_+\right)^{j+m} |j\,-j\rangle \tag{14}$$

Lösung Aufgabe 3.

1. Wir definieren die Varianzen und berechnen die Erwartunswerte der Drehimpulsoperatoren:

$$\begin{aligned}(\Delta J_x)^2 &= \langle J_x^2 \rangle - \langle J_x \rangle^2 \qquad \text{mit } \langle ... \rangle \equiv \langle jm| ... |jm\rangle \\ (\Delta J_y)^2 &= \langle J_y^2 \rangle - \langle J_y \rangle^2 \\ J_x &= \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \qquad J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) \\ \langle jm| J_\pm |jm\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\underbrace{\langle jm\,|jm\pm 1\rangle}_{=0} = 0 \\ \langle J_\pm \rangle = 0 & \qquad \Rightarrow \langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0\end{aligned}$$

Jetzt die quadrierten Operatoren:

$$\begin{aligned}J_x^2 &= \frac{1}{4}(J_+^2 + J_-^2 + J_+J_- + J_-J_+) \\ J_y^2 &= -\frac{1}{4}(J_+^2 + J_-^2 - J_+J_- - J_-J_+)\end{aligned}$$

Wie oben können wir zeigen:

$$\langle J_\pm^2 \rangle = 0 \quad \Rightarrow \langle J_x^2 \rangle = \langle J_y^2 \rangle = \frac{1}{4}\langle J_+J_- + J_-J_+ \rangle$$

Aus der Vorlesung wissen wir, dass:

$$\begin{aligned} J_+J_- &= \mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \\ J_-J_+ &= \mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z \\ \Rightarrow J_+J_- + J_-J_+ &= 2(\mathbf{J}^2 - J_z^2) \\ \Rightarrow \langle J_x^2 \rangle = \langle J_y^2 \rangle &= \frac{1}{2}\hbar^2(j(j+1) - m^2) \\ \Rightarrow \Delta J_x = \Delta J_y &= \hbar\sqrt{\frac{1}{2}(j(j+1) - m^2)} \end{aligned}$$

Das Minimum findne wir für $m = \pm j$, also Zustände $|jj\rangle$ und $|j-j\rangle$ mit

$$(\Delta J_x)_{min} = (\Delta J_y)_{min} = \hbar\sqrt{\frac{j}{2}}$$

2. (a) Wir setzen $m = j - x$ mit $x = 0, 1, 2, 3, ..., 2j$. Dann bleibt zu beweisen:

$$(J_-)^x |jj\rangle = \hbar^x \sqrt{\frac{(2j)!x!}{(2j-x)!}} |jj - x\rangle$$

Wir benutzen vollständige Induktion. $x = 1$:

$$J_- |jj\rangle = \hbar\sqrt{2j} |jj - 1\rangle$$

Induktionsschluss von x auf $x + 1$:

$$\begin{aligned} (J_-)^{x+1} |jj\rangle &= \hbar^x \sqrt{\frac{(2j)!x!}{(2j-x)!}} J_- |jj - x\rangle \\ &= \hbar^x \sqrt{\frac{(2j)!x!}{(2j-x)!}} \hbar\sqrt{(2j-x)(x+1)} |jj - x - 1\rangle \\ &= \hbar^{x+1} \sqrt{\frac{(2j)!(x+1)!}{(2j-(x+1)!}} |jj - (x+1)\rangle \end{aligned}$$

(b) Wir setzen $m = -j + x$ mit $x = 0, 1, 2, ..., 2j$ und haben dann zu zeigen, dass

$$(J_+)^x |j - j\rangle = \hbar^x \sqrt{\frac{(2j)!x!}{(2j-x)!}} |j - j + x\rangle$$

Wir benutzen wieder vollständige Induktion. $x = 1$:

$$J_+ |j - j\rangle = \hbar\sqrt{2j} |j - j + 1\rangle$$

Induktionsschluss von x auf $x + 1$:

$$\begin{aligned} (J_+)^{x+1} |j - j\rangle &= \hbar^x \sqrt{\frac{(2j)!x!}{(2j-x)!}} J_+ |j - j + x\rangle \\ &= \hbar^x \sqrt{\frac{(2j)!x!}{(2j-x)!}} \hbar\sqrt{(2j-x)(x+1)} |j - j + x + 1\rangle \\ &= \hbar^{x+1} \sqrt{\frac{(2j)!(x+1)!}{(2j-(x+1))!}} |j - j + x + 1\rangle \end{aligned}$$

Aufgabe 4. Hermitesch adjungierter Impulsoperator (2 Punkte)

Wir wissen, dass der Impulsoperator selbstadjungiert ist, also $\hat{p} = \hat{p}^\dagger$. Im Ortsraum impliziert dies, dass:

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger = i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad \text{und daher} \quad \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}. \tag{15}$$

Sie sehen also, dass die Adjungierte nicht equivalent zur komplex Konjugierten ist, wenn wir Differentialoperatoren behandeln. Ihr Ziel in diesem Problem ist es zu zeigen, dass $\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}$. Sie können dies tun, indem Sie die Definition der Adjungierten eines Operators, nämlich $\langle\phi|\hat{A}\psi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\phi|\psi\rangle$ benutzen (partielle Integration kann hier hilfreich sein).

Lösung Aufgabe 4.

This problem is solved by representing the inner product as an integral, then using integration by parts. We integrate over the entire physical space, which will denote $[a, b]$. We must argue that the boundary term for the wavefunctions $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ and $\phi^*(x) = \langle\phi|x\rangle$ disappear for the interval of integration, so $\phi^*(x)\psi(x)\Big|_b^a = 0$. If the interval $[a, b]$ covers the entire reals, then we must have $\lim_{x\to\pm\infty}\psi(x) = 0$ to ensure that the wavefunctions are square-integrable and hence the boundary term will be zero. If $[a, b]$ is finite due to an infinite potential well, then we must have $\psi(a) = \psi(b) = 0$ due to the boundary conditions from the potential and so the boundary terms must go to zero here. If the space is periodic, then the wavefunctions must be periodic, $\psi(a) = \psi(b)$ and $\phi(a) = \phi(b)$, and hence the boundary term must also be zero here, $\phi^*(a)\psi(a) - \phi^*(b)\psi(b) = 0$. So we can be sure that $\phi^*(x)\psi(x)\Big|_b^a = 0$. We define the differential operator as $\hat{D}$, so the goal is to find $\hat{D}^\dagger$. So we can write:

$$\begin{aligned}
\langle\phi|\hat{D}\psi\rangle &= \int_b^a \phi^*(x)\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right)dx \\
&= \left(\phi^*(x)\psi(x)\Big|_b^a - \int_b^a\left(\frac{\partial}{\partial x}\phi(x)^*\right)\psi(x)\,dx\right) \\
&= \int_b^a\left(-\frac{\partial}{\partial x}\phi(x)^*\right)\psi(x)\,dx \\
&= \langle\hat{D}^\dagger\phi|\psi\rangle \text{ by definition.}
\end{aligned}$$

By definition we also have:

$$\langle\hat{D}^\dagger\phi|\psi\rangle = \int_b^a\left(\frac{\partial}{\partial x}\phi(x)\right)^\dagger\psi(x)\,dx = \int_b^a\left(\left[\frac{\partial}{\partial x}\right]^\dagger\phi^*(x)\right)\psi(x)\,dx,$$

and therefore

$$\int_b^a\left(-\frac{\partial}{\partial x}\phi(x)^*\right)\psi(x)\,dx = \int_b^a\left(\left[\frac{\partial}{\partial x}\right]^\dagger\phi^*(x)\right)\psi(x)\,dx.$$

So, the adjoint of the differential operator must be $\hat{D}^\dagger = -\hat{D}$, and therefore $\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}$.