Moderne Theoretische Physik I
Grundlagen der Quantenmechanik

Blatt 12

Prof. A. Metelmann
S. Böhling, L. Orr, V. Stangier
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Abgabe bis: 21.07.2023, 14:00 Uhr

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

Aufgabe 1. Wigner-Eckart Theorem (12 Punkte)

In this problem we will consider a particle with angular momentum $j = 1$ in a magnetic field $\mathbf{B} = B_0 \sin\theta \cos\theta \cos\varphi$. This problem is an application of the Wigner-Eckart Theorem for the calculation of transition amplitudes. We recall that the Wigner-Eckart Theorem allows us to write the matrix elements of a spherical tensor operator as a product of a Clebsch-Gordan coefficient and a "reduced matrix element" which only depends on the total angular momenta:

$$\langle j'\, m' | T_q^{(k)} | j\, m \rangle = \langle j\, m, k\, q \,|\, j'\, m' \rangle \, \langle j \,||\, T^{(k)} \,||\, j' \rangle \, . \tag{1}$$

Since the reduced matrix element $\langle j \,||\, T^{(k)} \,||\, j' \rangle$ is not dependent on the value of m or m', or even the order of the spherical tensor operator q, we only need to calculate once when working with constant j and j'. For completeness, we recall that $\langle j'\, m', k\, q \,|\, j\, m \rangle$ are the Clebsch-Gordan coefficients.

1. (3 Punkte) A spherical tensor operator of rank k and order q will satisfy the following commutation relations with the angular momentum operators:

$$[\hat{J}_z, T_q^{(k)}] = \hbar q T_q^{(k)} \qquad [\hat{J}_\pm, T_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q\pm 1}^{(k)}. \tag{2}$$

   Since the order of the spherical tensor cannot exceed the rank, the following commutators must be zero:

$$[\hat{J}_+, T_k^{(k)}] = 0 \quad \text{and} \quad [\hat{J}_-, T_{-k}^{(k)}] = 0. \tag{3}$$

   The magnetic field $\mathbf{B}$ is the sum of two spherical tensor operators of order ± 1. Use these commutation relations to determine the rank these two spherical tensors, and give their explicit expressions.

2. (4 Punkte) We first consider transitions from an initial angular momentum $j = 1$ to $j = 1'$. What transitions are allowed here for the possible initial states, $|j\, m\rangle = |1\ {-1}\rangle\,, |1\, 0\rangle\,, |1\, 1\rangle$, and what are the transition elements?

3. (5 Punkte) Is a transition from an angular momentum of $j = 1$ to an angular momentum of $j' = 2$ possible? What about $j' = 3$? Where possible, list all allowed transitions and give the transition elements.

Lösung Aufgabe 1. (12 Punkte)

1. Here we must use the differential forms for the angular momentum operators

$$\hat{J}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \qquad \hat{J}_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot(\theta) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \tag{4}$$

We start by working out the commutation relation with the $\hat{J}_z$ operator:

$$[\hat{J}_z, \mathbf{B}] = i\hbar B_0 \sin\theta\cos\theta\cos\varphi = \frac{\hbar B_0}{2}\sin\theta\cos\theta\left(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}\right) \tag{5}$$

We can deduce from the given expressions that the magnetic field may be written as a combination of two spherical tensor operators of orders $k = \pm 1$. The global phase is up to us, so we to define $T_1^{(k)} = \sin\theta\cos\theta e^{i\varphi}$, but this choice is arbitrary. Using this definition we can work out the rank by evaluating successive commutators with $\hat{J}_+$ until we get 0.

$$[\hat{J}_+, T_{+1}^{(k)}] = -\hbar\sin^2\theta\, e^{2i\varphi} \propto T_{+2}^{(k)} \qquad [\hat{J}_+, -\sin^2\theta e^{2i\varphi}] = 0 \propto [\hat{J}_+, T_{+2}^{(k)}]. \tag{6}$$

Since the commutator $[\hat{J}_+, T_{+2}^{(k)}] = 0$ the rank must be $k = 2$. We can then work out the correct definition of $T_{-1}^{(2)}$ using the lowering operator:

$$[\hat{J}_-, T_{+1}^{(2)}] = \frac{\hbar}{2}(1 + 3\cos(2\varphi)) = \hbar\sqrt{6}T_0^{(2)} \qquad [\hat{J}_-, T_0^{(2)}] = -\hbar\sqrt{6}\sin(\theta)\cos(\theta)e^{-i\varphi} = \hbar\sqrt{6}T_{-1}^{(2)}. \tag{7}$$

It follows that $T_{-1}^{(2)} = -\sin(\theta)\cos(\theta)\, e^{-i\varphi}$. To conclude, we can write:

$$\mathbf{B} = \frac{B_0}{2}\left(T_{+1}^{(2)} - T_{-1}^{(2)}\right) \quad \text{where} \quad T_{\pm 1}^{(2)} = \pm\sin(\theta)\cos(\theta)\, e^{\pm i\varphi}. \tag{8}$$

As a note, the spherical tensor operators could have been defined to include $B_0/2$. The scaling itself does not matter, so long as the expressions for the spherical tensor operators are proportional to $\sin(\theta)\cos(\theta)\, e^{\pm i\varphi}$.

2. In order to solve this problem and the next we need to invoke the Wigner-Eckart Theorem, which will allow us to write the transition elements as follows:

$$\langle j'\, m'|\mathbf{B}|j\, m\rangle = \frac{B_0}{2}\langle j'\, m'|T_1^{(2)} - T_{-1}^{(2)}|j\, m\rangle = \frac{B_0}{2}\Big(\langle j\, m, 2\ 1|j'\, m'\rangle - \langle j\, m, 2\ {-1}|j'\, m'\rangle\Big)\langle j||T^{(2)}||j'\rangle\,. \tag{9}$$

For this problem specifically, we wish to find the non-zero transition elements from $j = 1$ to $j' = 1$:

$$\langle 1\, m'|\mathbf{B}|1\, m\rangle = \frac{B_0}{2}\Big(\langle 1\, m, 2\ 1|1\, m'\rangle - \langle 1\, m, 2\ {-1}|1\, m'\rangle\Big)\langle 1||T^{(2)}||1\rangle\,. \tag{10}$$

By checking the table of Clebsch-Gordan coefficients, we can determine that only the following elements are non-zero:

$$m = 0 \to m' = 1 : \langle 1\,0, 2\ 1|1\,1\rangle = -\sqrt{\frac{3}{10}} \qquad m = 0 \to m' = -1 : \langle 1\,0, 2\ {-1}|1\ {-1}\rangle = -\sqrt{\frac{3}{10}}$$
$$m = -1 \to m' = 0 : \langle 1\,0, 2\ 1|1\,1\rangle = \sqrt{\frac{3}{10}} \qquad m = 1 \to m' = 0 : \langle 1\,1, 2\ {-1}|1\,0\rangle = \sqrt{\frac{3}{10}} \tag{11}$$

To make full use of the Wigner-Eckart Theorem we must first solve for a transition that has the chance of being non-zero so we can calculate reduced matrix element $\langle 1||T^{(2)}||1\rangle$, which is independent of m,m', and the order of the spherical tensor operator. We will explicitly solve for the $m = 0 \to m' = 1$ transition, so we just need to evaluate the following integral:

$$\langle 1\,1|T_1^{(2)}|1\,0\rangle = \int_0^{\pi} d\theta\, \sin(\theta)\int_0^{2\pi}(Y_1^1(\theta,\varphi))^*\Big(\sin(\theta)\cos(\theta)\, e^{\pm i\varphi}\Big)Y_1^0(\theta,\varphi) = -\frac{\sqrt{2}}{5}. \tag{12}$$

We can then work out the following value for the reduced matrix element: $\langle 1||T^{(2)}||1\rangle = 2/\sqrt{15}$. I did this for completions sake; since all the coefficients are the same magnitude we don't actually need the reduced matrix element. Using the expression for $\mathbf{B}$ we can then state that only the following transitions are non-zero:

$$\langle j' = 1\ m' = 1|\mathbf{B}|j = 1\ m = 0\rangle = -\frac{B_0}{5\sqrt{2}} \qquad \langle j' = 1\ m' = -1|\mathbf{B}|j = 1\ m = 0\rangle = \frac{B_0}{5\sqrt{2}}$$
$$\langle j' = 1\ m' = 0|\mathbf{B}|j = 1\ m = -1\rangle = \frac{B_0}{5\sqrt{2}} \qquad \langle j' = 1\ m' = 0|\mathbf{B}|j = 1\ m = 1\rangle = -\frac{B_0}{5\sqrt{2}}. \tag{13}$$

3. Part 1: First we will consider the $j = 1$ to $j' = 2$ transitions, and so must evaluate the following:

$$\langle 2\, m' | \mathbf{B} | 1\, m \rangle = \frac{B_0}{2} \Big(\langle 1\, m, 2\ 1 | 2\, m' \rangle - \langle 1\, m, 2\ {-1} | 2\, m' \rangle \Big) \langle 1 || T^{(2)} || 2 \rangle \,. \tag{14}$$

Looking at the table of Clebsch-Gordan coefficients, we can see that $\langle 1\, 0, 2\ 1 | 2\, 1 \rangle = \sqrt{1/6}$ and $\langle 1\, 0, 2\ -1 | 2\, 1 \rangle = 0$ so this transition is possibly allowed. We then need to evaluate the integral:

$$\langle 2\, 1 | T_1^{(2)} | 1\, 0 \rangle = \int_0^\pi d\theta\, \sin(\theta) \int_0^{2\pi} (Y_2^1(\theta, \varphi))^* \Big(\sin(\theta) \cos(\theta)\, e^{\pm i\varphi} \Big) Y_1^0(\theta, \varphi) = 0. \tag{15}$$

From the Wigner-Eckart Theorem we know that:

$$\langle 2\, 1 | T_1^{(2)} | 1\, 0 \rangle = \langle 1\, 0, 2\ 1 | 2\, 1 \rangle \langle 1 || T^{(2)} || 2 \rangle = \sqrt{\frac{1}{6}} \langle 1 || T^{(2)} || 2 \rangle = 0 \tag{16}$$

and therefore the reduced matrix element must be zero, $\langle 1 || T^{(2)} || 2 \rangle = 0$. It follows from the Wigner-Eckart Theorem that all the matrix elements go to zero, $\langle 2\, m' | \mathbf{B} | 1\, m \rangle = 0$, and so for the given $\mathbf{B}$ no transitions from $j = 1$ to $j' = 2$ are possible.

Part 2: Next we consider the $j = 1$ to $j' = 3$ transitions. Again, we must evaluate the following:

$$\langle 3\, m' | \mathbf{B} | 1\, m \rangle = \frac{B_0}{2} \Big(\langle 1\, m, 2\ 1 | 3\, m' \rangle - \langle 1\, m, 2\ {-1} | 3\, m' \rangle \Big) \langle 1 || T^{(2)} || 3 \rangle \,. \tag{17}$$

Returning to the table of Clebsch-Gordan coefficients, we find that the following elements are non-zero:

$$\begin{aligned}
&j = 1, m = 1 \to j' = 3, m' = 2 : \langle 1\, 1, 2\ 1 | 3\, 2 \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} && j = 1, m = 1 \to j' = 3, m' = 0 : \langle 1\, 0, 2\ \ {-1} | 3\, 0 \rangle = \sqrt{\frac{1}{5}} \\
&j = 1, m = 0 \to j' = 3, m' = 1 : \langle 1\, 0, 2\ 1 | 3\, 1 \rangle = \sqrt{\frac{8}{15}} && j = 1 . m = 0 \to j' = 3, m' = -1 : \langle 1\, 0, 2\ \ {-1} | 3\ {-1} \rangle = \sqrt{\frac{8}{15}} \\
&j = 1, m = -1 \to j' = 3, m' = 0 : \langle 1\ {-1}, 2\ 1 | 3\, 0 \rangle = \sqrt{\frac{1}{5}} && j = 1, m = -1 \to j' = 3, m' = -2 : \langle 1\ {-1}, 2\ \ {-1} | 3\ {-2} \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}.
\end{aligned} \tag{18}$$

These are then the only allowed transitions. Once again, we solve an arbitrary transition to determine the reduced matrix element. We pick the $j = 1, m = 1 \to j' = 3, m' = 2$ transition:

$$\langle 3\, 2 | T_1^{(2)} | 1\, 1 \rangle = \int_0^\pi d\theta\, \sin(\theta) \int_0^{2\pi} (Y_3^2(\theta, \varphi))^* \Big(\sin(\theta) \cos(\theta)\, e^{\pm i\varphi} \Big) Y_1^1(\theta, \varphi) = -\frac{2}{\sqrt{35}}. \tag{19}$$

Using the Wigner-Eckart Theorem, we can work out that the reduced matrix element is $\langle 1 || T^{(2)} || 3 \rangle = -\sqrt{6/35}$. Using this, we can quickly calculate the non-zero transition elements:

$$\begin{aligned}
\langle j' = 3\ m' = 2 | \mathbf{B} | j = 1\ m = 1 \rangle &= -\frac{B_0}{\sqrt{35}} & \langle j' = 3\ m' = 0 | \mathbf{B} | j = 1\ m = 1 \rangle &= \frac{B_0}{5} \sqrt{\frac{3}{14}} \\
\langle j' = 3\ m' = 1 | \mathbf{B} | j = 1\ m = 0 \rangle &= -\frac{2B_0}{5\sqrt{7}} & \langle j' = 1\ m' = -1 | \mathbf{B} | j = 1\ m = 0 \rangle &= \frac{2B_0}{5\sqrt{7}} \\
\langle j' = 3\ m' = 0 | \mathbf{B} | j = 1\ m = -1 \rangle &= -\frac{B_0}{5} \sqrt{\frac{3}{14}} & \langle j' = 3\ m' = -2 | \mathbf{B} | j = 1\ m = -1 \rangle &= \frac{B_0}{\sqrt{35}}.
\end{aligned} \tag{20}$$

Aufgabe 2. Teilchen im dreidimensionalen Potentialtopf (8 Punkte)

Der Hamiltonian eines Teilchens in einem dreidimensionalen kugelsymmetrischen Potentialtopf ist gegeben durch

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hat{r}^2} + V(\hat{r}) \right) \tag{21}$$

mit einem kugelsymmetrischen Potential $V(r)$ und $\hat{p}_r = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r$. Dies lässt sich immer durch einen Produktansatz der Form

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{22}$$

lösen, wobei Y_{lm} die Kugelflächenfunktionen sind, für die $\hat{\mathbf{L}}^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1)Y_{lm}$ gilt. Hiermit erhält man für den Radialanteil $R(r)$ die effektiv eindimensionale Bestimmungsgleichung

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + V_{\text{eff}}(r)\right] R(r) = ER(r) \tag{23}$$

mit $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \hbar^2 l(l+1)/(2mr^2)$. In dieser Aufgabe betrachten wir einen endlichen, dreidimensionalen Potentialtopf, also

$$V(r) = \begin{cases} -U_0\,, & r < a \\ 0\,, & r > a \end{cases} \tag{24}$$

und suchen gebundene Zustände mit $-U_0 < E < 0$.

1. (1 Punkt) Der Hamilton-Operator in Gl. 23 enthält normalerweise erste und zweite Ableitungen der Funktionen $R(r)$. Machen Sie den Anatz $R(r) = u(r)r^\alpha$ und wählen Sie α so, dass die erste Ableitung verschwindet.

2. (3 Punkte) Bestimmen Sie aus Gl. 23 die Differentialgleichung für $u(r)$ und lösen Sie diese für $l = 0$ in den beiden Bereichen $r > a$ und $r < a$. Wie hängen die Lösungen jeweils von der Energie E ab? *Hinweis:* Berücksichtigen Sie, dass die gesuchte Lösung $R(r)$ in $r = 0$ endlich sein muss und für $r \to \infty$ verschwinden muss.

3. (1 Punkt) Bei $r = a$ müssen $u(r)$ und die Ableitung $u'(r)$ stetig sein. Notieren Sie beide Stetigkeitsbedingungen und bilden Sie deren Quotienten (die 'logarithmische Ableitung') um die erlaubten gebundenen Energieniveaus zu finden.

4. (3 Punkte) Finden Sie das niedrigste Energieniveau indem Sie die obige Bedingung auf die Form

$$\sin(ka) = \pm\sqrt{\frac{\hbar^2}{2ma^2U_0}}ka \tag{25}$$

bringen und diskutieren Sie, wann diese Gleichung nicht-triviale Lösungen hat. Gibt es für jedes U_0 einen gebundenen Zustand? *Hinweis:* Drücken Sie den Impuls im Bereich $r > a$ durch den Impuls im Bereich $r < a$ aus und verwenden Sie $\sqrt{1-x^2}/x = \cot(\arcsin(x))$. Berücksichtigen Sie auch, dass aus der vorherigen Teilaufgabe eine zusätzliche Bedingung an das Vorzeichen von $\cot(ka)$ folgt.

Lösung Aufgabe 2. (8 Punkte)

1. 1 Punkt: Man erält

$$\hat{p}_r^2 u(r)r^\alpha = -\hbar^2\left(\alpha(\alpha+1)r^{\alpha-2}u(r) + 2(\alpha+1)r^{\alpha-1}\frac{\partial u(r)}{\partial r} + r\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2}\right).$$

Für $\alpha = -1$ verschwindet der Term mit der ersten Ableitung und man erhält

$$\hat{p}_r^2\frac{u(r)}{r} = -\hbar^2\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2}\right).$$

2. Mit dem Ergebnis der vorherigen Aufgabe bringt man die Schrödinger Gl. auf die Form (1 Punkt)

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 + V_{eff}(r)\right)\frac{u(r)}{r} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} + V(r)\frac{u(r)}{r} + \frac{1}{2m}\frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2}\frac{u(r)}{r} = E\frac{u(r)}{r} \\
\Leftrightarrow &-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} + V(r)u(r) + \frac{1}{2m}\frac{\hbar^2 l(l+1)}{r^2}u(r) = Eu(r)\,.
\end{aligned}$$

Für $l = 0$ und das gegebene $V(r)$ erhält man eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung.
Bereich $r < a$ (1 Punkt):
In diesem Bereich erhält man

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} - U_0 u(r) = Eu(r)\,.$$

Dies wird gelöst durch $u(r) = e^{\pm ikr}$ mit $k = \sqrt{\frac{2m(E+U_0}{\hbar^2}}$, wobei $E + U_0 > 0$ für gebundene Zustände. Damit die Lösung $R(r)$ für $r = 0$ nicht divergiert, wählen wir

$$u(r) = c_1 \sin(kr)\,, \quad \to R(r) = c_1 \frac{\sin(kr)}{r}$$

Bereich $r > a$ (1 Punkt):
In diesem Bereich erhält man

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u(r)}{\partial r^2} = EU(r)\,.$$

Dies wird gelöst durch $u(r) = e^{\pm\kappa r}$ mit $\kappa = \frac{2m(-E)}{\hbar^2}$, wobei $E > 0$ für gebundene Zustände. Damit die Lösung $R(r)$ für $r \to \infty$ normierbar ist, wählen wir

$$u(r) = c_2 e^{-\kappa r}\,. \quad \to \quad R(r) = c_2 \frac{e^{-\kappa r}}{r}$$

3. 1 Punkt: Für die Stetigkeit von $u(r)$ ergibt sich

$$c_1 \sin(ka) = c_2 e^{-\kappa a}$$

und für die Ableitung

$$c_1 k \cos(ka) = -c_2 \kappa e^{-\kappa a}\,.$$

Um die erlaubten Energieniveaus zu bestimmen, bilden wir den Quotienten dieser Ausdrücke und erhalten

$$\frac{k}{\tan(ka)} = -\kappa$$

4. (3 Punkte) Zunächst verwenden wir

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m(U_0 - \frac{\hbar^2 k^2}{2m})}{\hbar^2}} = \frac{1}{a}\sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} - k^2 a^2}\,.$$

Damit schreibt sich die Stetigkeitsbedingung

$$\begin{aligned}
k\cot(ka) &= -\kappa = -\frac{1}{a}\sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} - k^2 a^2} \\
\Leftrightarrow \cot(ka) &= \frac{\sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} - k^2 a^2}}{-ka} \\
&= \sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2}}\frac{\sqrt{1 - \left(\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}\right)^2}}{-ka} \\
&= \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{k\hbar}{2mU_0}\right)^2}}{\frac{-k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}} = \cot\left(\arcsin\left[-\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}\right]\right) \\
\Leftrightarrow ka + n\pi &= \arcsin\left[-\frac{k\hbar}{\sqrt{2mU_0}}\right] \\
\Leftrightarrow \sin(ka) &= \pm\frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0 a^2}} ka\,.
\end{aligned}$$

Gleichzeitig folgt aus $\cot(ka) = -\kappa/k$, dass $cot(ka) < 0$. Dies trifft im Intervall $0 < ka < \pi$ genau auf den Bereich $\pi/2 < ka < \pi$ zu. Nun suchen wir das minimale k, das diese Bedingungen löst. Da konstnte Lösungen nicht normierbar sind, ist $k = 0$ keine relevante Lösung. Es gibt nicht immer eine Lösung für diese Bestimmungsgleichung, da die Steigung $\frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0a^2}}$ so hoch sein kann, dass der Schnittpunkt im Bereich $0 < ka < \pi/2$ liegt. Die maximale Steigung, bei der es einen Schnittpunkt gibt, ist gerade durch $ka = \pi/2$ gekennzeichnet. Hier gilt

$$1 = \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0a^2}}\frac{\pi}{2} \Leftrightarrow U_0 = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}\,.$$

Für flachere Potentialtöpfe gibt es keine gebundenen Zustände.