

Moderne Theoretische Physik II (WS 2024/25)

Prof. Dr. A. Shnirman
Adrian ReichLösungen zu Blatt 8
Besprechung 07.01.2025

1. Zwei identische Teilchen im harmonischen Oszillator (12 Punkte)

Wir betrachten zwei identischen Teilchen, die sich im Potential eines eindimensionalen harmonischen Oszillators befinden. Zunächst vernachlässigen wir die Wechselwirkung zwischen den Teilchen.

- a) Bestimmen Sie den Entartungsgrad des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes, wenn es sich um (i) Spin-1/2-Teilchen (Fermionen) handelt und wenn es sich um (ii) Spin-1-Teilchen (Bosonen) handelt. (5 Punkte)

Wir führen nun eine schwache, abstoßende Wechselwirkung $V(x_1 - x_2) = -\frac{g}{2}(x_1 - x_2)^2$, $g \ll m\omega^2$, zwischen den Teilchen ein. Der Hamiltonian lautet damit

$$H = H_0^{(1)} + H_0^{(2)} - \frac{g}{2}(x_1 - x_2)^2, \quad H_0^{(i)} = \frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x_i^2, \quad (1)$$

wobei $x_{i=1,2}$ die Koordinate des jeweiligen Teilchens ist.

- b) Berechnen Sie für beide Fälle (i) und (ii) die Korrekturen zur Energie des ersten angeregten Zustandes in erster Ordnung Störungstheorie. Welche Spin-Konfigurationen sind energetisch bevorzugt? (7 Punkte)

Lösungsvorschlag

- a) (i) Die Spin-Zustände zweier Spin-1/2-Teilchen teilen sich auf in ein Triplett mit $S = 1$ und symmetrischen Zuständen

$$|S = 1, m_S = +1\rangle = |m_{s,1} = +\frac{1}{2}\rangle |m_{s,2} = +\frac{1}{2}\rangle = |\uparrow\rangle |\uparrow\rangle \quad (2)$$

$$|S = 1, m_S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle) \quad (3)$$

$$|S = 1, m_S = -1\rangle = |\downarrow\rangle |\downarrow\rangle \quad (4)$$

sowie ein Singulett mit $S = 0$ und antisymmetrischem Zustand

$$|S = 0, m_S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle). \quad (5)$$

Die Ortsraumkomponenten der Wellenfunktion sind beschrieben durch harmonische Oszillatoren. Der Grundzustand $|0\rangle_{\text{HO}} = |n_1 = 0, n_2 = 0\rangle_{\text{HO}}$ ist symmetrisch, der erste angeregte Zustand beinhaltet sowohl symmetrische als auch antisymmetrische Anteile

$$|1\rangle_{\text{HO,S}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n_1 = 1, n_2 = 0\rangle_{\text{HO}} + |n_1 = 0, n_2 = 1\rangle_{\text{HO}}) \quad (6)$$

$$|1\rangle_{\text{HO,A}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n_1 = 1, n_2 = 0\rangle_{\text{HO}} - |n_1 = 0, n_2 = 1\rangle_{\text{HO}}) \quad (7)$$

Da die gesamte Wellenfunktion antisymmetrisch sein muss (Fermionen), kann der Spin-Anteil im Grundzustand nur durch das Singulett gegeben sein. Der Grundzustand ist also nicht entartet. Der erste angeregte Zustand hingegen ist 4-fach entartet, da der symmetrische harmonische Oszillator-Zustand mit dem Spin-Singulett kombiniert werden kann, und der antisymmetrische mit dem Spin-Triplett (1+3=4).

- (ii) Zwei Spin-1-Bosonen lassen sich kombinieren zu einem Quintuplett mit Spin $S = 2$ und symmetrischen Zuständen

$$|S = 2, m_S = +2\rangle = |m_{s,1} = +1\rangle |m_{s,2} = +1\rangle \quad (8)$$

$$|S = 2, m_S = +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+1\rangle |0\rangle + |0\rangle |+1\rangle) \quad (9)$$

$$|S = 2, m_S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|+1\rangle |-1\rangle + 2|0\rangle |0\rangle + |-1\rangle |+1\rangle) \quad (10)$$

$$|S = 2, m_S = -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle |0\rangle + |0\rangle |-1\rangle) \quad (11)$$

$$|S = 2, m_S = -2\rangle = |-1\rangle |-1\rangle \quad (12)$$

sowie einem Triplett mit $S = 1$ und antisymmetrischen Zuständen

$$|S = 1, m_S = +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+1\rangle |0\rangle - |0\rangle |+1\rangle) \quad (13)$$

$$|S = 1, m_S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+1\rangle |-1\rangle - |-1\rangle |+1\rangle) \quad (14)$$

$$|S = 1, m_S = -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-1\rangle |0\rangle - |0\rangle |-1\rangle) \quad (15)$$

und schließlich einem Singulett mit $S = 0$ und symmetrischem Zustand

$$|S = 0, m_S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|+1\rangle |-1\rangle - |0\rangle |0\rangle + |-1\rangle |+1\rangle). \quad (16)$$

Die Gesamtwellenfunktion muss symmetrisch sein (Bosonen). Folglich ist der Grundzustand 5+1=6-fach entartet und der erste angeregte Zustand 5+3+1=9-fach entartet, wobei für die symmetrischen Oszillator-Zustände der Gesamtspin $S = 0$ oder $S = 2$ sein kann und für den antisymmetrischen nur $S = 1$.

- b) Die Wechselwirkung beeinflusst lediglich den Oszillator-Anteil der Wellenfunktion. Wir berechnen zunächst die relevanten Matrixelemente. Es ist

$$V = -\frac{g}{2}(x_1 - x_2)^2 = -\frac{\hbar g}{4m\omega} [a_1^{\dagger 2} + a_1^2 + a_1 a_1^{\dagger} + a_1^{\dagger} a_1 + a_2^{\dagger 2} + a_2^2 + a_2 a_2^{\dagger} + a_2^{\dagger} a_2 - 2(a_1^{\dagger} a_2 + a_1 a_2^{\dagger} + a_1^{\dagger} a_2^{\dagger} + a_1 a_2)] \quad (17)$$

mit den Leiteroperatoren a_i , die jeweils auf den Oszillator-Zustand des Teilchens i wirken. Damit (alle Zustände hier sind Oszillator-Zustände $|n_1, n_2\rangle$)

$$I \equiv \langle 1, 0 | V | 1, 0 \rangle = -\frac{\hbar g}{4m\omega} \langle 1, 0 | a_1 a_1^{\dagger} + a_1^{\dagger} a_1 + a_2 a_2^{\dagger} | 1, 0 \rangle = -\frac{\hbar g}{m\omega} = \langle 0, 1 | V | 0, 1 \rangle, \quad (18)$$

$$J \equiv \langle 1, 0 | V | 0, 1 \rangle = \frac{\hbar g}{2m\omega} \langle 1, 0 | a_1^{\dagger} a_2 | 0, 1 \rangle = \frac{\hbar g}{2m\omega} = \langle 0, 1 | V | 1, 0 \rangle. \quad (19)$$

- (i) Der Singulett-Zustand erhält die Korrektur

$$\delta E_{S=0} = {}_{\text{HO},S} \langle 1 | V | 1 \rangle_{\text{HO},S} = I + J, \quad (20)$$

während die Energie der drei Triplett-Zustände jeweils um

$$\delta E_{S=1} = {}_{\text{HO,A}} \langle 1|V|1 \rangle_{\text{HO,A}} = I - J, \quad (21)$$

korrigiert wird (da die Spin-Zustände orthogonal zueinander sind gibt es keine Nicht-Diagonalelemente von V in diesem entarteten Unterraum). Wir können damit $J > 0$ als die Austauschenergie identifizieren, die dafür sorgt, dass die Triplett-Zustände eine niedrigere Energie aufweisen als der Singulett-Zustand.

- (ii) Mit Bosonen ist die Situation sehr ähnlich: Der Singulett und die Quintuplett-Zustände erhalten die Energiekorrektur

$$\delta E_{S=0} = \delta E_{S=2} = {}_{\text{HO,S}} \langle 1|V|1 \rangle_{\text{HO,S}} = I + J \quad (22)$$

und die Triplett-Zustände

$$\delta E_{S=1} = {}_{\text{HO,A}} \langle 1|V|1 \rangle_{\text{HO,A}} = I - J. \quad (23)$$

Auch hier werden also die drei Triplett-Zustände durch die Austauschwechselwirkung energetisch bevorzugt und liegen bei einer niedrigeren Energie als der Singulett- und die fünf Quintuplett-Zustände. Allerdings ist hier, im Gegensatz zu Fall (i), der Spin-Anteil der energetisch bevorzugten Zustände antisymmetrisch.

2. Helium-Atom

(3 Punkte)

- a) Beschreiben Sie qualitativ was mit den Energieniveaus im Helium-Atom passieren würde, wenn Elektronen Bosonen mit Spin 1 wären. (2 Punkte)
- b) Zustände des Helium-Atoms mit Gesamtspin $S = 0$ werden auch Parahelium genannt, solche mit $S = 1$ Orthohelium. Dies hat historische Gründe: Orthohelium-Zustände sind so langlebig, dass man in frühen Spektroskopie-Experimenten davon ausgegangen ist, dass es sich tatsächlich um zwei unterschiedliche Atome handelte.

Wie lässt sich (qualitativ) die relative Langlebigkeit von Orthohelium erklären? (1 Punkt)

Lösungsvorschlag

- a) Wir haben in Aufgabe 1 gesehen, dass der Spin-Anteil der Wellenfunktion zweier Spin-1-Bosonen in ein Quintuplett ($S = 2$), ein Triplett ($S = 1$) und ein Singulett ($S = 0$) eingeteilt werden kann, wobei die Triplettzustände antisymmetrisch unter Austausch der Teilchen sind und die Quintuplett- und Singulett-Zustände symmetrisch.

Da der Orstanteil der Grundzustandswellenfunktion symmetrisch ist, und die gesamte Wellenfunktion für Bosonen auch symmetrisch sein muss, wäre der Grundzustand des Heliumatoms 6-fach entartet, wobei diese Entartung auch nicht durch die Wechselwirkung zwischen den Elektronen aufgehoben werden würde.

Die angeregten Zustände wären ohne Wechselwirkung $9n^2$ -fach entartet (zur Erinnerung: in den angeregten Zuständen des Helium-Atoms ist ein Elektron im Grundzustand $(1, 0, 0)$ und das andere besetzt ein Niveau (n, l, m) mit $n > 1$, wobei die Energie des Einteilchen-Niveaus nur von n abhängt). Argumentieren wir analog zur Vorlesung, so finden wir auch hier, dass die Korrekturen nur von n und l , nicht von m abhängig sind. Die Entartung bzgl. l wird also aufgehoben und in erster Ordnung Störungstheorie spalten sich die Zustände für gegebenes (n, l) auf in einen $(5 + 1) \cdot (2l + 1)$ -fach entarteten Unterraum und einen $3 \cdot (2l + 1)$ -fach entarteten Unterraum.

- b) Da der Hamiltonian ohne Feinstruktur-Korrekturen mit dem Gesamtspinoperator kommutiert, ist dieser auf diesem Niveau erhalten. Übergänge zwischen Para- und Orthoheliumzuständen sind deshalb erst durch die Spin-Bahn-Kopplung möglich, die sich als kleine relativistische Korrektur herausstellt. Durch die Kleinheit dieser Korrektur sind diese Übergänge also unwahrscheinlich, was die Langlebigkeit von Orthohelium erklärt, obwohl dieses nur als ein angeregter Zustand des Heliumatoms existieren kann.

3. Vollständige Differentiale

(5 Punkte)

Das vollständige (oder totale) Differential dF einer Funktion $F(x_1, x_2, \dots, x_N)$ ist definiert als

$$dF = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial F}{\partial x_i} \right)_{x_j \neq i} dx_i, \quad (24)$$

wobei der Index an der partiellen Ableitung signalisiert, dass alle Variablen, außer der, nach der abgeleitet wird, konstant gehalten werden.

Gegeben sei nun eine Differentialform $\omega = f(x, y)dx + g(x, y)dy$ mit $(x, y) \in \mathbb{R}^2$.

- a) Zeigen Sie: Ist ω ein vollständiges Differential, so gilt

$$\left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_x = \left(\frac{\partial g}{\partial x} \right)_y. \quad (2 \text{ Punkte}) \quad (25)$$

- b) Zeigen Sie außerdem: Ist ω ein vollständiges Differential, so gilt

$$\oint_C \omega = 0 \quad (26)$$

für jeden geschlossenen Integrationspfad C . (3 Punkte)

Lösungsvorschlag

- a) Ist ω ein vollständiges Differential, so existiert eine Funktion $h(x, y)$ mit $dh = \omega$, also $f = \partial_x h$ und $g = \partial_y h$. Damit folgt

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial y} = \frac{\partial g}{\partial x}, \quad (27)$$

was zu zeigen war. Wir haben dabei ausgenutzt, dass (vorausgesetzt h ist hinreichend glatt), die Reihenfolge partieller Ableitungen vertauscht werden kann.

- b) Wir können schreiben

$$\oint_C \omega = \oint_{\partial A} \mathbf{v}(x, y) \cdot d\mathbf{s}, \quad (28)$$

wobei wir C als den Rand einer Fläche A auffassen, wir das Vektorfeld $\mathbf{v} = (f, g, 0)^T$ definiert haben und $d\mathbf{s}$ das infinitesimale Element entlang des Weges C ist. Nun nutzen wir den Satz von Stokes, der besagt

$$\oint_{\partial A} \mathbf{v}(x, y) \cdot d\mathbf{s} = \int_A \text{rot } \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A}. \quad (29)$$

Es ist

$$\text{rot } \mathbf{v} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \partial_x g - \partial_y f \end{pmatrix} \quad (30)$$

und aus Aufgabenteil a) folgt damit $\oint_C \omega = 0$.

Anmerkung: Wir haben den Umstand, dass $\oint_C \omega = 0$ für ein totales Differential ω , hier nur für den zweidimensionalen Fall gezeigt. Tatsächlich gilt dies aber auch ganz allgemein für n Dimensionen, wie sich mit dem verallgemeinerten Satz von Stokes ($\oint_{\partial A} \omega = \int_A d\omega$) zeigen lässt (da $d(dh) = 0$).