Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg — Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann
Sommersemester 2021 — Obertutor: Dr. Carsten Littek

Übungsblatt 10

Besprechung in den virtuellen Übungsgruppen in der Woche 21. - 25. Juni 2021
Bitte geben Sie maximal 2 Aufgaben per Übungsgruppensystem zur Korrektur an Ihre Tutorin / Ihren Tutor!
Nutzen Sie dazu den Link `https://uebungen.physik.uni-heidelberg.de/h/1291`

1. *Verständnisfragen*

a) Erläutern Sie, wieso der Hamilton-Operator für geladene Teilchen in elektromagnetischen Feldern von dem Viererpotential A^μ abhängt. Kann das Vektorpotential gemessen werden? Begründen Sie Ihre Antwort.

b) Worin besteht die Dipolnäherung, und warum ist sie in vielen Fällen akzeptabel?

c) Inwiefern geht die Eichung des elektromagnetischen Feldes in den Hamilton-Operator ein?

2. *Exponentialfunktion und Leiteroperatoren*

Wir wollen uns im Zusammenhang mit kohärenten Zuständen des harmonischen Oszillators (vgl. Übungsblatt 7) mit der Exponentialfunktion für Auf- und Absteigeoperatoren beschäftigen.

(a) Zeigen Sie explizit mittels der Reihendarstellung der Exponentialfunktion für Operatoren, dass

$$a\, e^{za^\dagger} = z\, e^{za^\dagger} + e^{za^\dagger}\, a$$

gilt. Hier ist $z \in \mathbb{C}$ und $a, a^\dagger$ sind die Leiteroperatoren des harmonischen Oszillators.

(b) Zeigen Sie, dass sich die kohärenten Zustände, die Sie auf Übungsblatt 7 kennengelernt haben, mittels des unitären Operators $\hat{D}(z) \equiv e^{za^\dagger - z^* a}$ aus dem Vakuum erzeugen lassen, also dass $\hat{D}(z)\,|0\rangle = |z\rangle = e^{-|z|^2/2} e^{z\hat{a}^\dagger}\,|0\rangle$.
Hinweis: Benutzen Sie die Baker-Campbell-Hausdorff Formel, deren Spezialfälle Sie auf Übungsblatt 2 diskutiert haben.

3. *Dreidimensionaler isotroper harmonischer Oszillator*

Betrachten Sie ein Teilchen der Masse $\tilde{m}$ im dreidimensionalen Oszillatorpotenzial

$$V(\vec{x}) = \frac{1}{2}\tilde{m}\omega^2\vec{x}^2.$$

Der Hamiltonoperator des Systems ist gegeben durch

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{3} \hat{H}_i \qquad \text{mit} \qquad \hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2\tilde{m}} + \frac{1}{2}\tilde{m}\omega^2\hat{x}_i^2.$$

Ist $\mathcal{H}_i$ der Zustandsraum des Variablenpaares $\{\hat{p}_i, \hat{x}_i\}$, so ist der Zustandsraum des Gesamtsystems gegeben durch das Tensorprodukt $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3$. Man definiert nun für jedes Variablenpaar $\{\hat{x}_i, \hat{p}_i\}$ analog zum eindimensionalen Fall Auf- und Absteigeoperatoren

$$\hat{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{\tilde{m}\omega}\,\hat{x}_i - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{\tilde{m}\omega}}\,\hat{p}_i\right) \qquad \text{und} \qquad \hat{a}_i = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{\tilde{m}\omega}\,\hat{x}_i + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{\tilde{m}\omega}}\,\hat{p}_i\right).$$

Diese erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$\left[\hat{a}_i, \hat{a}_j\right] = \left[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\right] = 0 \qquad \text{und} \qquad \left[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\right] = \delta_{ij}.$$

Die zugehörigen Teilchenzahloperatoren sind gegeben durch $\hat{N}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$. Sind $|n_i\rangle$ die Eigenvektoren des Hamiltonoperators $\hat{H}_i$, so bilden $|n_1 n_2 n_3\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle$ in $\mathcal{H}$ ein vollständiges Orthonormalsystem. Ist $|000\rangle$ der Eigenvektor des Grundzustands, so ist

$$\begin{aligned} \hat{a}_1 |000\rangle = \hat{a}_2 |000\rangle = \hat{a}_3 |000\rangle = 0, \\ |n_1 n_2 n_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! n_3!}} \left(\hat{a}_1^\dagger\right)^{n_1} \left(\hat{a}_2^\dagger\right)^{n_2} \left(\hat{a}_3^\dagger\right)^{n_3} |000\rangle . \end{aligned}$$

Aus der Vorlesung wissen Sie, dass bei einem Zentralpotenzial $\hat{H}, \hat{L}^2$ und $\hat{L}_3$ auch einen vollständigen Satz kommutierender Observabler bilden. Die gemeinsamen Eigenvektoren sind durch die Quantenzahlen n, ℓ und m gekennzeichnet mit den zugehörigen Eigenwerten E_n, $\hbar^2 \ell(\ell+1)$ und $\hbar m$. Die Zustände $|n\ell m\rangle$ ergeben sich aus den Zuständen $|n_1 n_2 n_3\rangle$ durch unitäre Transformation.

a) Drücken Sie die Operatoren $\hat{L}_1$, $\hat{L}_2$ und $\hat{L}_3$ durch die Operatoren $\hat{a}_i^\dagger$ und $\hat{a}_i$ aus.

Betrachten Sie die Zustände mit der Energie $E = \hbar\omega\left(1 + \frac{3}{2}\right)$. Die zugehörigen Eigenvektoren von $\hat{H}$ in der $|n_1 n_2 n_3\rangle$ Darstellung sind dann $|100\rangle$, $|010\rangle$, $|001\rangle$. Diese bilden eine Basis des Unterraumes der Eigenvektoren von $\hat{H}$ zum Eigenwert $E = \frac{5}{2}\hbar\omega$.

b) Geben Sie die Matrix an, die dem Operator $\hat{L}_3$ bezüglich dieser Basis zugeordnet ist und bestimmen Sie die zugehörigen Eigenwerte und Eigenvektoren von $\hat{L}_3$ als Linearkombinationen der Zustände $|100\rangle$, $|010\rangle$, $|001\rangle$.

c) Zeigen Sie, dass die in b) konstruierten Eigenvektoren von $\hat{L}_3$ auch Eigenvektoren von $\hat{L}^2$ zum Eigenwert $2\hbar^2$ sind (d.h. also, dass $\ell = 1$ ist). Drücken Sie dazu $\hat{L}^2$ durch $\hat{a}_i^\dagger$ und $\hat{a}_i$ aus und wenden Sie $\hat{L}^2$ dann direkt auf die Eigenvektoren an.

d) Geben Sie die Ortsraumdarstellung der Zustände $|100\rangle$, $|010\rangle$ und $|001\rangle$ an und zeigen Sie, dass die in b) als Eigenvektoren von $\hat{L}_3$ konstruierten Linearkombinationen dieser Funktionen tatsächlich

$$\psi_{1m}(r, \vartheta, \varphi) = C r \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} \, Y_{1m}(\vartheta, \varphi)$$

mit $C = \text{const.}$, $m = \{0, \pm 1\}$ und $\alpha = \sqrt{\tilde{m}\omega/\hbar}$ ergeben.

4. Algebraische Herleitung des Wasserstoff-Spektrums

Das Coulomb-Potential (und damit das Wasserstoff-Problem) besitzt eine verborgene Symmetrie, die es erlaubt, das Spektrum rein algebraisch herzuleiten. Diese Herleitung wollen wir hier durchführen. Konsequenz der verborgenen Symmetrie, die nur beim Coulomb-Potential auftritt, ist die Existenz einer zusätzlichen Erhaltungsgröße, des Lenz'schen Vektors*

$$\hat{\vec{F}} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{p}}\right) - \frac{Ze^2}{r}\hat{\vec{x}}.$$

Dieser Vektor ist hermitesch (überzeugen Sie sich davon), vertauscht mit dem Hamilton-Operator des Coulomb-Problems und ist senkrecht zum Drehimpuls.

*Wir bleiben bei der Notation von Zettel 9. Beachten Sie, dass im Vorlesungsskript der Lenz'sche Vektor als $\hat{\vec{Q}} = \hat{\vec{F}}/(Ze^2)$ in Gleichung (9.59) definiert ist.

a) Zeigen Sie folgende Relationen:

$$\hat{\vec{x}} \cdot \left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}\right) = \hat{\vec{L}}^2$$
$$\left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}\right) \cdot \hat{\vec{x}} = \hat{\vec{L}}^2 + 2\mathrm{i}\hbar \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{x}}$$
$$\left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}\right)^2 = \hat{\vec{p}}^2 \hat{\vec{L}}^2$$
$$\hat{\vec{p}} \cdot \left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}\right) = 0$$
$$\left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}\right) \cdot \hat{\vec{p}} = 2\mathrm{i}\hbar \hat{\vec{p}}^2$$

und nutzen Sie diese um $\hat{\vec{F}}^2$ darzustellen als

$$\hat{\vec{F}}^2 = \frac{2}{m}\hat{H}\left(\hat{\vec{L}}^2 + \hbar^2\right) + Z^2 e^4.$$

Laut dieser Darstellung lassen sich die Energieeigenwerte, d.h. die Eigenwerte vom Hamilton-Operator $\hat{H}$, aus den Eigenwerten von $\hat{\vec{F}}^2$ berechnen.

b) Im Folgenden wollen wir zeigen, dass $\hat{\vec{L}}$ und $\hat{\vec{F}}$ eine geschlossene Algebra bilden, die $\hat{H}$ involviert. Leiten Sie dazu folgende Kommutator-Relationen her

$$\left[\hat{F}_i, \hat{F}_j\right] = -\frac{2\mathrm{i}\hbar}{m}\epsilon_{ijk}\hat{H}\hat{L}_k, \qquad \left[\hat{L}_i, \hat{F}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{F}_k$$

her.

c) In Abschnitt 9.2.4 im Vorlesungsskript finden Sie die Operatoren

$$\hat{\vec{U}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\vec{L}} + \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{\vec{F}}\right), \qquad \hat{\vec{V}} = \frac{1}{2}\left(\hat{\vec{L}} - \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{\vec{F}}\right)$$

Zeigen Sie

$$\left[\hat{U}_i, \hat{U}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}U_k, \qquad \left[\hat{V}_i, \hat{V}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{V}_k, \qquad \left[\hat{U}_i, \hat{V}_j\right] = 0.$$

Diese Vertauschungsrelationen entsprechen Algebren zweier unabhängiger Drehgruppen, $SO(3)\times SO(3)$. Diese Symmetrie ist (lokal) isomorph zu $O(4)$.

d) Argumentieren Sie, dass die möglichen Eigenwerte der Operatoren $\hat{\vec{U}}$ und $\hat{\vec{V}}$ nur die Werte $\hbar^2 u(u+1)$ bzw $\hbar^2 v(v+1)$ mit $u, v \in \mathbb{N}_0/2$ annehmen können. Zeigen Sie, dass

$$\hat{\vec{U}}^2 = \hat{\vec{V}}^2 = \frac{1}{4}\left(\hat{\vec{L}}^2 + \left(-\frac{m}{2\hat{H}}\right)\hat{\vec{F}}^2\right)$$

und daher $u = v$ gilt.

e) Wenden Sie nun $\hat{\vec{U}}^2$ auf Eigenzustände des Hamilton-Operators zum Eigenwert E an. Benutzen Sie die Relation aus Teil a), um daraus die möglichen Werte von E zu bestimmen. Bringen Sie schließlich das Ergebnis auf die bekannte Form mit der Hauptquantenzahl n.

Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2021

Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann
Obertutor: Dr. Carsten Littek

Übungsblatt 10: Lösung

1. *Verständnisfragen*

a) Sie wissen aus Ihrer Elektrodynamik-Vorlesung, dass die Wirkung für geladene Teilchen einen Term enthalten muss, der ein solches Teilchen an das elektromagnetische Feld koppelt. Dieser lautet in kovarianter Schreibweise

$$S_{\mathrm{e-m}} = c^{-2} \int \mathrm{d}^4 x j^\mu A_\mu,$$

wobei $j^m u$ die Vierer-Stromdichte und A^μ das Viererpotential sind. In nichtrelativistischer Näherung ergibt sich daraus der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} - \frac{q}{c}\vec{A}(\hat{x})\right)^2 + q\Phi(\hat{x})$$

für ein Teilchen der Masse m und Ladung q.
Die Wellenfunktion eines Teilchens in einem Vektorpotential $\vec{A}$ hängt von einem Phasenfaktor folgender Form ab

$$\psi = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\right)\exp\left(\frac{\mathrm{i}q}{\hbar c}\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}_1} \vec{A}\cdot \mathrm{d}\vec{x}\right).$$

Dies ist der Aharonov-Bohm-Effekt. Einen Phasenfaktor allein können wir nicht messen, da eine Messung immer das Betragsquadrat der Wellenfunktion einschließt. Allerdings kann durch Interferenz zweier Teilchen eine Phasendifferenz gemessen werden. Wie Sie in der Vorlesung gesehen haben, führt dies zu der Messung des magnetischen Flusses und nicht des Vektorpotentials. Das Vektorpotential kann also nicht direkt gemessen werden. Dies ergibt auch Sinn, da die physikalischen Größen die eichinvarianten elektrischen und magnetischen Felder und nicht ihre eichabhängigen Potentiale sind.

b) Nehmen wir an, dass ein (Wasserstoff-)Atom durch ein Strahlungsfeld gestört wird. Das bedeutet, dass der Hamilton-Operator für ein Atom, für welches Sie die Wellenfunktion kennen, durch einen weiteren Term der Form $\Delta\hat{H} \propto \vec{A}\cdot\hat{p}$ gestört wird. Das Strahlungsfeld soll einer einfallenden Welle entsprechen und hat deshalb die Form

$$\vec{A} = \vec{A}_0 \exp\left(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x} - \mathrm{i}\omega t\right) + \text{c.c.},$$

wobei c.c. für 'complex conjugate' steht. Die Dipol-Näherung besteht darin, die Phase $\exp(\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{x}) \simeq 1$ zu nähern. Das bedeutet, dass das Produkt $\vec{k}\cdot\vec{x} \ll 1$ ist. Der Betrag des Wellenvektors entspricht der inversen Wellenlänge λ^{-1} und $|\vec{x}|$ der Ausdehnung des Atoms, d.h. der Länge auf der das Atom gestört wird. Die Dipol-Näherung ist also akzeptabel, falls die Ausdehnung des Atoms deutlich kleiner ist als die Wellenlänge der einfallenden Strahlung.

c) Die Eichung des elektromagnetischen Feldes ist in der Form des kinetischen Impulses

$$\hat{\pi} = \hat{p} - \frac{q}{c}\vec{A}$$

relevant. Der Hamilton-Operator enthält das Quadrat des kinetischen Impulses $\hat{\pi}$ und der Impulsoperator $\hat{p}$ vertauscht im Allgemeinen nicht mit dem Vektorpotential $\vec{A}$, da dieses ortsabhängig ist. Daher gilt

$$\begin{aligned}\left(\hat{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2 &= \hat{p}^2 - \frac{q}{c}\hat{p}\cdot\vec{A} - \frac{q}{c}\vec{A}\cdot\hat{p} + \frac{q^2}{c^2}\vec{A}^2 \\ &= \hat{p}^2 - \frac{q}{c}\left(\hat{p}\cdot\vec{A}\right) - \frac{2q}{c}\vec{A}\cdot\hat{p} + \frac{q^2}{c^2}\vec{A}^2,\end{aligned}$$

wobei wir die Produktregel im zweiten Term genutzt haben. In Ortsdarstellung ist der zweite Term in der zweiten Zeile proportional zu $\nabla\cdot\vec{A}$. Falls das Vektorpotential Coulomb-geeicht ist, ist dieser Term exakt Null.
Die Eichung des elektromagnetischen Feldes ist also für das Quadrat des kinetischen Impulses ausschlaggebend.

2. *Exponentialfunktion und Leiteroperatoren*

a) Wir benutzen die Reihendarstellung der Exponentialfunktion

$$\begin{aligned}a\,\mathrm{e}^{za^\dagger} &= a\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(za^\dagger)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{a(za^\dagger)^n}{n!} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{z^n(a^\dagger)^{n-1}n}{n!} + \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(za^\dagger)^n a}{n!} \\ &= z\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(za^\dagger)^{n-1}}{(n-1)!} + \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(za^\dagger)^n a}{n!} \\ &= z\,\mathrm{e}^{za^\dagger} + \mathrm{e}^{za^\dagger}\,a\end{aligned}$$

b) Wir haben auf Zettel 2 gezeigt, dass ein Spezialfall der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel lautet

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\,\mathrm{e}^{\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]},$$

falls die Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ mit ihrem Kommutator $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ vertauschen. Aus der Vorlesung ist bekannt, dass $\left[a,a^\dagger\right] = 1$. Daher verschwinden die folgenden Kommutatoren

$$\left[\left[a,a^\dagger\right],a\right] = 0 = \left[\left[a,a^\dagger\right],a^\dagger\right]$$

und natürlich für alle höheren Kommutatoren ebenso. Außerdem gilt wegen $a\,|0\rangle = 0$, dass $\mathrm{e}^{-z^*a}\,|0\rangle = |0\rangle$.

$$\begin{aligned}|z\rangle &= \mathrm{e}^{\frac{-|z|^2}{2}}\,\mathrm{e}^{za^\dagger}\,|0\rangle \\ &= \mathrm{e}^{\frac{-|z|^2}{2}}\,\mathrm{e}^{za^\dagger}\,\mathrm{e}^{-z^*a}\,|0\rangle \\ &= \mathrm{e}^{\frac{-|z|^2}{2}}\,\mathrm{e}^{za^\dagger-z^*a-\frac{|z|^2}{2}[a^\dagger,a]}\,|0\rangle \\ &= \mathrm{e}^{\frac{-|z|^2}{2}}\,\mathrm{e}^{za^\dagger-z^*a}\,\mathrm{e}^{\frac{|z|^2}{2}}\,|0\rangle \\ &= \hat{D}(z)\,|0\rangle\end{aligned}$$

3. *Dreidimensionaler isotroper harmonischer Oszillator*

a) Wir haben bereits schon mehrmals auf vorangegangenen Übungszetteln gesehen, wie Orts- und Impulsoperator ausgedrückt durch Auf- und Absteigeoperator aussehen. Verallgemeinert auf drei Dimensionen gilt für sie

$$\hat{x}_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2\tilde{m}\omega}}\left(\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger\right) \qquad \text{und} \qquad \hat{p}_i = -\mathrm{i}\sqrt{\frac{\tilde{m}\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger\right).$$

Die dritte Komponente des Drehimpulsoperators ist durch Orts- und Impulsoperatoren gegeben durch

$$\begin{aligned}
\hat{L}_3 &= \hat{x}_1\hat{p}_2 - \hat{x}_2\hat{p}_1 \\
&= -\mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar}{2\tilde{m}\omega}}\sqrt{\frac{\tilde{m}\hbar\omega}{2}}\left[\left(\hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger\right)\left(\hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger\right) - \left(\hat{a}_2 + \hat{a}_2^\dagger\right)\left(\hat{a}_1 - \hat{a}_1^\dagger\right)\right] \\
&= -\mathrm{i}\frac{\hbar}{2}\left(\hat{a}_1\hat{a}_2 - \hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2 - \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_2\hat{a}_1 + \hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger - \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_1^\dagger\right) \\
&= \mathrm{i}\hbar\left(\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger\right).
\end{aligned}$$

Analog gilt für die anderen beiden Komponenten also

$$\hat{L}_1 = \mathrm{i}\hbar\left(\hat{a}_2\hat{a}_3^\dagger - \hat{a}_3\hat{a}_2^\dagger\right) \qquad \text{und} \qquad \hat{L}_2 = \mathrm{i}\hbar\left(\hat{a}_3\hat{a}_1^\dagger - \hat{a}_1\hat{a}_3^\dagger\right).$$

b) Die Matrix, die dem Operator $\hat{L}_3$ in der Besetzungszahlbasis zugeordnet ist, ist gegeben durch

$$L_3 = \begin{pmatrix} \langle 100|\hat{L}_3|100\rangle & \langle 100|\hat{L}_3|010\rangle & \langle 100|\hat{L}_3|001\rangle \\ \langle 010|\hat{L}_3|100\rangle & \langle 010|\hat{L}_3|010\rangle & \langle 010|\hat{L}_3|001\rangle \\ \langle 001|\hat{L}_3|100\rangle & \langle 001|\hat{L}_3|010\rangle & \langle 001|\hat{L}_3|001\rangle \end{pmatrix} = \mathrm{i}\hbar\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

denn unter Ausnutzung von z.B.

$$\hat{a}_1|n_1n_2n_3\rangle = \sqrt{n_1}\,|(n_1-1)n_2n_3\rangle \qquad \text{und} \qquad \hat{a}_1^\dagger|n_1n_2n_3\rangle = \sqrt{n_1+1}\,|(n_1+1)n_2n_3\rangle$$

ist

$$\begin{aligned}
\langle 100|\hat{L}_3|100\rangle &= \mathrm{i}\hbar\langle 100|\left(\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger\right)|100\rangle = \mathrm{i}\hbar\langle 100|010\rangle = 0, \\
\langle 100|\hat{L}_3|010\rangle &= \mathrm{i}\hbar\langle 100|\left(\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger\right)|010\rangle = -\mathrm{i}\hbar\langle 100|100\rangle = -\mathrm{i}\hbar, \\
\langle 100|\hat{L}_3|001\rangle &= \mathrm{i}\hbar\langle 100|\left(\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger\right)|001\rangle = 0, \\
\langle 010|\hat{L}_3|100\rangle &= \mathrm{i}\hbar\langle 010|\left(\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger\right)|100\rangle = \mathrm{i}\hbar\langle 010|010\rangle = \mathrm{i}\hbar, \\
\langle 010|\hat{L}_3|010\rangle &= \mathrm{i}\hbar\langle 010|\left(\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger\right)|010\rangle = -\mathrm{i}\hbar\langle 010|100\rangle = 0, \\
\langle 010|\hat{L}_3|001\rangle &= \mathrm{i}\hbar\langle 010|\left(\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger\right)|001\rangle = 0, \\
\langle 001|\hat{L}_3|100\rangle &= \mathrm{i}\hbar\langle 001|\left(\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger\right)|100\rangle = \mathrm{i}\hbar\langle 001|010\rangle = 0, \\
\langle 001|\hat{L}_3|010\rangle &= \mathrm{i}\hbar\langle 001|\left(\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger\right)|010\rangle = -\mathrm{i}\hbar\langle 001|100\rangle = 0, \\
\langle 001|\hat{L}_3|001\rangle &= \mathrm{i}\hbar\langle 001|\left(\hat{a}_1\hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_2\hat{a}_1^\dagger\right)|001\rangle = 0.
\end{aligned}$$

Das charakteristische Polynom von L_3 ist gegeben durch

$$\det(L_3 - \lambda I) = \begin{vmatrix} -\lambda & -\mathrm{i}\hbar & 0 \\ \mathrm{i}\hbar & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda(\lambda^2 - \hbar^2) \stackrel{!}{=} 0.$$

Folglich sind die Eigenwerte $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = \hbar$ und $\lambda_3 = -\hbar$.
Bestimme nun die Eigenvektoren zu den Eigenwerten. Für $\lambda_1 = 0$ gilt, dass

$$\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i}\hbar & 0 \\ \mathrm{i}\hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Folglich ist $x = y = 0$ und $z = z$, und der entsprechende (korrekt normierte) Eigenvektor ist $|\ell, m = 0\rangle = (0, 0, 1)^{\mathrm{T}}$.
Für $\lambda_2 = \hbar$ gilt, dass

$$\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i}\hbar & 0 \\ \mathrm{i}\hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix},$$

und dementsprechend

$$\begin{aligned} -x - \mathrm{i}y &= 0 & \Rightarrow \qquad y &= \mathrm{i}x, \\ \mathrm{i}x - y &= 0 & \Rightarrow \qquad y &= \mathrm{i}x, \\ z &= 0. \end{aligned}$$

Folglich ist der entsprechende (korrekt normierte) Eigenvektor $|\ell, m = 1\rangle = 1/\sqrt{2}\,(1, \mathrm{i}, 0)^{\mathrm{T}}$.
Für $\lambda_3 = -\hbar$ gilt, dass

$$\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i}\hbar & 0 \\ \mathrm{i}\hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = -\hbar \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix},$$

und dementsprechend

$$\begin{aligned} x - \mathrm{i}y &= 0 & \Rightarrow \qquad y &= -\mathrm{i}x, \\ \mathrm{i}x + y &= 0 & \Rightarrow \qquad y &= -\mathrm{i}x, \\ z &= 0. \end{aligned}$$

Folglich ist der entsprechende (korrekt normierte) Eigenvektor $|\ell, m = -1\rangle = 1/\sqrt{2}\,(1, -\mathrm{i}, 0)^{\mathrm{T}}$.
Zusammenfassend gilt also, dass

$$\begin{aligned} |\ell, m = 0\rangle &= |001\rangle\,, \\ |\ell, m = 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|100\rangle + \mathrm{i}\,|010\rangle\Big), \\ |\ell, m = -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|100\rangle - \mathrm{i}\,|010\rangle\Big). \end{aligned}$$

c) Benutze im Folgenden, dass $\hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2$. Ausgedrückt durch die Auf- und Absteigeoperatoren gilt also

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= -\hbar^2 \left[\left(\hat{a}_2 \hat{a}_3^\dagger - \hat{a}_3 \hat{a}_2^\dagger \right)^2 + \left(\hat{a}_3 \hat{a}_1^\dagger - \hat{a}_1 \hat{a}_3^\dagger \right)^2 + \left(\hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_2 \hat{a}_1^\dagger \right)^2 \right] \\ &= -\hbar^2 \left[\hat{a}_2^2 \hat{a}_3^{\dagger\,2} + \hat{a}_3^2 \hat{a}_2^{\dagger\,2} + \hat{a}_3^2 \hat{a}_1^{\dagger\,2} + \hat{a}_1^2 \hat{a}_3^{\dagger\,2} + \hat{a}_1^2 \hat{a}_2^{\dagger\,2} + \hat{a}_2^2 \hat{a}_1^{\dagger\,2} \right] \\ &\quad + 2\hbar^2 \left[\hat{N}_1 \hat{N}_2 + \hat{N}_1 \hat{N}_3 + \hat{N}_2 \hat{N}_3 + \hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 \right], \end{aligned}$$

wobei benutzt wurde, dass $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \hat{N}_i$ und $\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger = \hat{N}_i + 1$. Für die weitere Betrachtung kann berücksichtigt werden, dass die Zustände $|100\rangle$, $|010\rangle$, $|001\rangle$ nur einfach besetzt sind, d.h. also dass das zweifache Anwenden eines Absteigeoperators auf einen dieser Zustände (oder auch

Superpositionen von diesen) immer Null ergibt. Außerdem ergibt $\hat{N}_i \hat{N}_j$ mit $i \neq j$ aus demselben Grund auch immer Null. Also gilt *für obige Zustände*, dass

$$\hat{L}^2 = 2\hbar^2 \left(\hat{N}_1 + \hat{N}_2 + \hat{N}_3 \right).$$

Demenentsprechend sind die Zustände $|100\rangle$, $|010\rangle$, $|001\rangle$ Eigenzustände zu $\hat{L}^2$ mit Eigenwert $2\hbar^2$, d.h. $\ell = 1$. Folglich sind es auch $|\ell, m = 0\rangle$, $|\ell, m = 1\rangle$ und $|\ell, m = -1\rangle$, da sie Linearkombinationen von ihnen sind.

d) Verwende im Folgenden, dass $H_0(x) = 1$ und $H_1(x) = 2x$. Die Ortsraumdarstellungen der Zustände $|100\rangle$, $|010\rangle$ und $|001\rangle$ sind mit $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ gegeben durch

$$\begin{aligned}
\langle \vec{x} | 100 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{3/4} \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} H_1(\alpha x) H_0(\alpha y) H_0(\alpha z) = \sqrt{2} \left(\frac{\alpha^{10}}{\pi^3} \right)^{1/4} x \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2}, \\
\langle \vec{x} | 010 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{3/4} \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} H_0(\alpha x) H_1(\alpha y) H_0(\alpha z) = \sqrt{2} \left(\frac{\alpha^{10}}{\pi^3} \right)^{1/4} y \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2}, \\
\langle \vec{x} | 001 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{3/4} \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} H_0(\alpha x) H_0(\alpha y) H_1(\alpha z) = \sqrt{2} \left(\frac{\alpha^{10}}{\pi^3} \right)^{1/4} z \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2}.
\end{aligned}$$

Verwende nun Kugelkoordinaten mit $x = r \sin\vartheta \cos\varphi$, $y = r \sin\vartheta \sin\varphi$, und $z = r \cos\vartheta$.
Für $|\ell = 1, m = 0\rangle$ gilt, dass

$$\begin{aligned}
\psi_{10}(r, \vartheta, \varphi) &= \sqrt{2} \left(\frac{\alpha^{10}}{\pi^3} \right)^{1/4} z \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} \\
&= \sqrt{2} \left(\frac{\alpha^{10}}{\pi^3} \right)^{1/4} r \cos\vartheta \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} \\
&= C r \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} \, Y_{10}(\vartheta, \varphi),
\end{aligned}$$

da $\cos\vartheta = \sqrt{4\pi/3} \, Y_{10}(\vartheta, \varphi)$.
Für $|\ell = 1, m = 1\rangle$ gilt, dass

$$\begin{aligned}
\psi_{11}(r, \vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(\langle \vec{x} | 100 \rangle + \mathrm{i} \, \langle \vec{x} | 010 \rangle \Big) = \left(\frac{\alpha^{10}}{\pi^3} \right)^{1/4} (x + \mathrm{i}y) \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} \\
&= \left(\frac{\alpha^{10}}{\pi^3} \right)^{1/4} r \sin\vartheta \, (\cos\varphi + \mathrm{i} \sin\varphi) \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} \\
&= \left(\frac{\alpha^{10}}{\pi^3} \right)^{1/4} r \sin\vartheta \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} \\
&= C r \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} \, Y_{11}(\vartheta, \varphi),
\end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt verwendet wurde, dass $\sin\vartheta \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} = -\sqrt{8\pi/3} \, Y_{11}(\vartheta, \varphi)$ ist.
Für $|\ell = 1, m = -1\rangle$ gilt, dass

$$\begin{aligned}
\psi_{1,-1}(r, \vartheta, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(\langle \vec{x} | 100 \rangle - \mathrm{i} \, \langle \vec{x} | 010 \rangle \Big) = \left(\frac{\alpha^{10}}{\pi^3} \right)^{1/4} (x - \mathrm{i}y) \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} \\
&= \left(\frac{\alpha^{10}}{\pi^3} \right)^{1/4} r \sin\vartheta \, (\cos\varphi - \mathrm{i} \sin\varphi) \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} \\
&= \left(\frac{\alpha^{10}}{\pi^3} \right)^{1/4} r \sin\vartheta \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} \\
&= C r \, \mathrm{e}^{-\alpha^2 r^2/2} \, Y_{1,-1}(\vartheta, \varphi),
\end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt verwendet wurde, dass $\sin\vartheta \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} = \sqrt{8\pi/3} \, Y_{1,-1}(\vartheta, \varphi)$ ist.

4. Algebraische Herleitung des Wasserstoff-Spektrums

Dass der Runge-Lenz-Vektor in der gegebenen Form hermitesch ist, lässt sich leicht einsehen, wenn man den Operator $\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}$ adjungiert

$$\hat{\vec{D}}^\dagger = \left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}\right)^\dagger = \left(\epsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{L}_k\right)^\dagger = \epsilon_{ijk}\hat{L}_k^\dagger\hat{p}_j^\dagger = -\hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{p}}.$$

Damit können wir den Runge-Lenz-Vektor schreiben als

$$\hat{\vec{F}} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{D}} + \hat{\vec{D}}^\dagger\right) - \frac{Ze^2}{r}\hat{\vec{x}}.$$

Die anderen beiden Eigenschaften haben Sie bereits auf Übungsblatt 9 gezeigt.

a) Wir zeigen die Relationen

$$\begin{aligned}
\hat{\vec{x}} \cdot \left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}\right) &= \hat{x}_i\epsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{L}_k = \left(\hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}}\right) \cdot \hat{\vec{L}} = \hat{\vec{L}}^2 \quad \checkmark \\
\left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}\right) \cdot \hat{\vec{x}} &= \epsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{L}_k\hat{x}_i = \epsilon_{ijk}\epsilon_{klm}\hat{p}_j\hat{x}_l\hat{p}_m\hat{x}_i = \hat{p}_j\hat{x}_i\hat{p}_j\hat{x}_i - \hat{p}_j\hat{x}_j\hat{p}_i\hat{x}_i \\
&= \hat{\vec{x}}^2\hat{\vec{p}}^2 - \left(\hat{\vec{x}} \cdot \hat{\vec{p}}\right)^2 + \mathrm{i}\hbar\hat{\vec{x}} \cdot \hat{\vec{p}} + 2\mathrm{i}\hbar\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{x}} = \hat{\vec{L}}^2 + 2\mathrm{i}\hbar\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{x}} \quad \checkmark \\
\left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}\right)^2 &= \epsilon_{ijk}\epsilon_{klm}\hat{p}_i\hat{L}_j\hat{p}_l\hat{L}_m = \hat{p}_i\hat{L}_j\hat{p}_i\hat{L}_j - \hat{p}_i\hat{L}_j\hat{p}_j\hat{L}_i \\
&= \hat{\vec{p}}^2\hat{\vec{L}}^2 - \hat{p}_i\left[\hat{p}_i, \hat{L}_j\right]\hat{L}_j - 0 = \hat{\vec{p}}^2\hat{\vec{L}}^2 - \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}\hat{p}_i\hat{L}_j = \hat{\vec{p}}^2\hat{\vec{L}}^2 \quad \checkmark \\
\hat{\vec{p}} \cdot \left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}\right) &= \hat{p}_i\epsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{L}_k = \left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{p}}\right) \cdot \hat{\vec{L}} = 0 \quad \checkmark \\
\left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}\right) \cdot \hat{\vec{p}} &= \epsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{L}_k\hat{p}_i = \epsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{p}_i\hat{L}_k - \epsilon_{ijk}\hat{p}_j\left[\hat{p}_i, \hat{L}_k\right] \\
&= -\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\epsilon_{ikm}\hat{p}_j\hat{p}_m = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ikj}\epsilon_{ikm}\hat{p}_j\hat{p}_m = 2\mathrm{i}\hbar\delta_{jm}\hat{p}_j\hat{p}_m = 2\mathrm{i}\hbar\hat{\vec{p}}^2 \quad \checkmark
\end{aligned}$$

Dabei haben wir $\epsilon_{ijk}\epsilon_{klm} = \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta jl$ sowie einige Kommutatorrelationen benutzt. Die Rechnung für $\hat{\vec{F}}^2$ sollte mit diesen Relationen kein Problem sein.

b) Der Kommutator $\left[\hat{L}_i, \hat{F}_j\right]$ ist schnell gezeigt, wenn man die Kommutatoren zwischen dem Orts-, Impuls- und Drehimpulsoperator ausnutzt.
Der Kommutator zwischen den Komponenten des Runge-Lenz-Vektors enhält die Terme

$$\left[\hat{F}_i, \hat{F}_j\right] = \frac{1}{4m^2}\left[\hat{D}_i + \hat{D}_i^\dagger, \hat{D}_j + \hat{D}_j^\dagger\right] + \frac{Ze^2}{2m}\left(\left[\hat{D}_i + \hat{D}_i^\dagger, \frac{\hat{x}_j}{r}\right] + \left[\frac{\hat{x}_i}{r}, \hat{D}_j + \hat{D}_j^\dagger\right]\right).$$

Wir schauen uns zunächst den ersten Term an

$$\begin{aligned}
\left[\hat{D}_i + \hat{D}_i^\dagger, \hat{D}_j + \hat{D}_j^\dagger\right] &= \left[\hat{D}_i, \hat{D}_j\right] - \left[\hat{D}_i, \hat{D}_j\right]^\dagger + \left[\hat{D}_i^\dagger, \hat{D}_j\right] - \left[\hat{D}_i^\dagger, \hat{D}_j\right]^\dagger \\
&= -4\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{\vec{p}}^2\hat{L}_k.
\end{aligned}$$

Da haben wir ausgenutzt, dass

$$\begin{aligned}
\left[\hat{D}_i, \hat{D}_j\right] &= \epsilon_{ikl}\left(\hat{p}_k\left[\hat{L}_l, \hat{D}_j\right] + \left[\hat{p}_k, \hat{D}_j\right]\hat{L}_l\right) \\
&= \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ikl}\left(\epsilon_{ljm}\hat{p}_k D_m + \left(\hat{p}_k\hat{p}_j - \delta_{kj}\hat{\vec{p}}^2\right)\hat{L}_l\right) \\
&= -\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijm}\hat{\vec{p}}^2\hat{L}_m \\
\left[\hat{D}_i^\dagger, \hat{D}_j\right] &= -\epsilon_{ikl}\left(\hat{L}_k\left[\hat{p}_l, \hat{D}_j\right] + \left[\hat{L}_k, \hat{D}_j\right]\hat{p}_l\right) \\
&= \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k\hat{\vec{p}}^2 + 2\hbar^2\left(\hat{p}_i\hat{p}_j - \delta_{ij}\hat{\vec{p}}^2\right).
\end{aligned}$$

Der Vektor $\hat{e}_i = \hat{x}_i/r$ ist der Einheitsvektor in i Richtung. Wir benötigen den Kommutator des Einheitsvektors mit dem Vektor $\hat{\vec{D}}$.

$$\begin{aligned}\left[\hat{e}_i, \hat{D}_j\right] &= \epsilon_{jkl}\left(\hat{p}_k\left[\hat{e}_i, \hat{L}_l\right] + \left[\hat{e}_i, \hat{p}_k\right]\hat{L}_l\right) \\ &= \mathrm{i}\hbar\epsilon_{jkl}\left(\epsilon_{ilm}\hat{p}_k\hat{e}_m + \frac{1}{r}\left(\delta_{ik} - \hat{e}_i\hat{e}_j\right)\hat{L}_l\right).\end{aligned}$$

Damit haben wir auch $\left[\hat{e}_i, \hat{D}_j^\dagger\right] = -\left[\hat{e}_i, \hat{D}_j\right]^\dagger$ berechnet. Damit bekommen wir für den letzten Term im Kommutator der Komponenten des Runge-Lenz-Vektors

$$\begin{aligned}\left[\hat{D}_i + \hat{D}_i^\dagger, \frac{\hat{x}_j}{r}\right] + \left[\frac{\hat{x}_i}{r}, \hat{D}_j + \hat{D}_j^\dagger\right] &= -\frac{4\mathrm{i}\hbar}{r}\epsilon_{ijk}\hat{L}_k + 2\mathrm{i}\hbar\left(\hat{e}_j\hat{p}_i - \hat{e}_i\hat{p}_j\right) - \frac{2\mathrm{i}\hbar}{r}\left(\epsilon_{jkm}\hat{e}_i\hat{e}_k\hat{L}_m - \epsilon_{ikm}\hat{e}_j\hat{e}_k\hat{L}_m\right) \\ &= -\frac{4\mathrm{i}\hbar}{r}\epsilon_{ijk}\hat{L}_k,\end{aligned}$$

wobei wir benutzt haben, dass

$$\epsilon_{jkm}\hat{e}_i\hat{e}_k\hat{L}_m = r\hat{e}_i\hat{e}_j\left(\hat{\vec{e}}\cdot\hat{\vec{p}}\right) - r\hat{e}_i\hat{p}_j$$

ist. Setzen wir die Terme zusammen ergibt sich für den gesuchten Kommutator

$$\left[\hat{F}_i, \hat{F}_j\right] = -\frac{2\mathrm{i}\hbar}{m}\epsilon_{ijk}\hat{H}\hat{L}_k.$$

c) Für die Kommutatoren gilt

$$\begin{aligned}\left[\hat{U}_i, \hat{U}_j\right] &= \frac{1}{4}\left[\hat{L}_i + \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_i, \hat{L}_j + \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_j\right] \\ &= \frac{1}{4}\left(\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] + \left[\hat{L}_i, \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_j\right] + \left[\sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_i, \hat{L}_j\right] + \left[\sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_i, \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_j\right]\right) \\ &= \frac{1}{4}\left(\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k + \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{F}_k - \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\epsilon_{jik}\hat{F}_k - \frac{m}{2\hat{H}}\frac{-2\mathrm{i}\hbar}{m}\epsilon_{ijk}\hat{H}\hat{L}_k\right) \\ &= \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{U}_k \quad \checkmark \\ \left[\hat{V}_i, \hat{V}_j\right] &= \frac{1}{4}\left[\hat{L}_i - \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_i, \hat{L}_j - \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_j\right] \\ &= \frac{1}{4}\left(\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] - \left[\hat{L}_i, \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_j\right] - \left[\sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_i, \hat{L}_j\right] + \left[\sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_i, \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_j\right]\right) \\ &= \frac{1}{4}\left(\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k - \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{F}_k + \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\epsilon_{jik}\hat{F}_k - \frac{m}{2\hat{H}}\frac{-2\mathrm{i}\hbar}{m}\epsilon_{ijk}\hat{H}\hat{L}_k\right) \\ &= \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{V}_k \quad \checkmark \\ \left[\hat{U}_i, \hat{V}_j\right] &= \frac{1}{4}\left[\hat{L}_i + \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_i, \hat{L}_j - \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_j\right] \\ &= \frac{1}{4}\left(\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] - \left[\hat{L}_i, \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_j\right] + \left[\sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_i, \hat{L}_j\right] - \left[\sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_i, \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\hat{F}_j\right]\right) \\ &= \frac{1}{4}\left(\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k - \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{F}_k - \sqrt{-\frac{m}{2\hat{H}}}\epsilon_{jik}\hat{F}_k - \frac{-m}{2\hat{H}}\frac{-2\mathrm{i}\hbar}{m}\epsilon_{ijk}\hat{H}\hat{F}_k\right) \\ &= 0 \quad \checkmark\end{aligned}$$

d) Da beide Operatoren $\hat{\vec{U}}$ und $\hat{\vec{V}}$ die Eigenschaften eines Drehimpulses haben, sind die Eigenwerte so zu wählen wie für andere Drehimpulse auch. Also sind die Eigenwerte $\hbar^2 u(u+1)$ bzw. $\hbar^2 v(v+1)$

mit $u, v \in \mathbb{N}_0/2$ ähnlich wie beim Bahndrehimpuls.

Die Quadrate der beiden Operatoren sind identisch, da $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{F}} = \hat{\vec{F}} \cdot \hat{\vec{L}} = 0$ und es ergibt sich die Relation aus der Aufgabe.

e) Es sei nun $|\psi\rangle$ ein Eigenzustand des Hamilton-Operators zum Eigenwert E. Da $\hat{\vec{U}}^2$ mit dem Hamilton-Operator vertauscht (warum?), können diese Operatoren gleichzeitig diagonalisiert werden. Mit anderen Worten sind Eigenzustände des Hamilton-Operators auch Eigenzustände des Operators $\hat{\vec{U}}^2$. Dann ergibt sich

$$\begin{aligned}
\hat{\vec{U}}^2 |\psi\rangle &= \frac{1}{4}\left(\hat{\vec{L}}^2 + \left(\frac{-m}{2\hat{H}}\hat{\vec{F}}^2\right)\right)|\psi\rangle \\
4\hbar^2 u(u+1)\,|\psi\rangle &= \left(\hat{\vec{L}}^2 - \left(\hat{\vec{L}}^2 + \hbar^2\right) - \frac{mZ^2e^4}{2\hat{H}}\right)|\psi\rangle \\
&= \left(\hbar^2\ell(\ell+1) - \hbar^2(\ell(\ell+1)+1) - \frac{mZ^2e^4}{2E}\right)|\psi\rangle \\
\Rightarrow \hbar^2(4u(u+1)+1) &= -\frac{mZ^2e^4}{2E} \\
\Rightarrow E &= -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2(4u(u+1)+1)} = -\frac{Z^2\mathrm{Ry}}{n^2}
\end{aligned}$$

Damit kommen wir auf das gleiche Ergebnis wie im Skript mit $n = 2u + 1$ in Gleichung (9.66).