Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2021

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

Übungsblatt 9

Besprechung in den virtuellen Übungsgruppen in der Woche 14. - 18. 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) Nennen Sie die eine wesentliche Annahme im Hamilton-Operator des Zweiteilchensystems und überlegen Sie sich deren physikalische Konsequenzen.

b) Konstruieren Sie Situationen, in denen die Hamilton-Operatoren der Schwerpunkts- und der Relativbewegung nicht vertauschen.

c) Üblicherweise sind Energie-Eigenwerte diskret, wenn das System einen Rand hat. Wie geht dieses oder ein vergleichbares Argument in die Behandlung des Wasserstoffatoms ein?

2. *Herleitung der Pauli-Matrizen*

In dieser Aufgabe soll die bekannte Form der Pauli-Matrizen für den Drehimpuls $j = \frac{1}{2}$ aus den allgemeinen Eigenschaften des Drehimpulsoperators $\hat{\vec{J}}$ hergeleitet werden. Dazu betrachte man die Zustände $|j, j_3\rangle$, die Eigenzustände zu $\hat{J}^2$ und $\hat{J}_3$ sind,

$$\hat{J}^2 \,|j, j_3\rangle = \hbar^2 j(j+1)\,|j, j_3\rangle\,,$$
$$\hat{J}_3\,|j, j_3\rangle = \hbar j_3\,|j, j_3\rangle\,.$$

Darüber hinaus wurden in der Vorlesung die Leiteroperatoren $\hat{J}_+ = \hat{J}_1 + \mathrm{i}\hat{J}_2$ und $\hat{J}_- = \hat{J}_1 - \mathrm{i}\hat{J}_2$ definiert, die wie folgt auf den Zustand $|j, j_3\rangle$ wirken,

$$\hat{J}_\pm\,|j, j_3\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - j_3(j_3 \pm 1)}\,|j, j_3 \pm 1\rangle\,.$$

Für den Drehimpuls $j = \frac{1}{2}$ kann j_3 die Werte $-\frac{1}{2}$ und $+\frac{1}{2}$ annehmen. Wählen Sie für die folgenden Überlegungen die übliche Darstellung

$$|\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \qquad |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Wie Sie bereits gesehen haben, schreibt man für den Fall $j = \frac{1}{2}$ in dieser Darstellung $\vec{J} = \vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$, wobei $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)^\mathrm{T}$ der Vektor der Pauli-Matrizen ist.

Leiten Sie, ausgehend von den obigen Relationen für den Drehimpuls, die explizite Darstellung der Pauli-Matrizen her,

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}, \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\\mathrm{i} & 0\end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}.$$

3. *Kugelflächenfunktionen*

Wie Sie in der Vorlesung gesehen haben, sind die *Kugelflächenfunktionen* $Y_{\ell m}$ ein orthonormales System von Eigenfunktionen des Laplace-Operators auf der Kugel. Sie sind in Kugelkoordinaten gegeben durch

$$Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\, P_\ell^m(\cos\vartheta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\,.$$

Hierbei sind ℓ und m ganzzahlig mit $\ell \geq 0$ und $-\ell \leq m \leq \ell$. Die *zugeordneten Legendre-Funktionen* P_ℓ^m sind gegeben durch

$$P_\ell^m(u) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!}\frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}(1-u^2)^{-m/2}\frac{\mathrm{d}^{\ell-m}}{\mathrm{d}u^{\ell-m}}(1-u^2)^\ell.$$

a) Rechnen Sie Y_{22}, Y_{21}, Y_{20}, $Y_{2,-1}$ sowie Y_{30} explizit aus.

b) Vergewissern Sie sich (mit möglichst wenig Rechenaufwand), dass Ihre Ergebnisse paarweise orthogonal sind.

c) Entwickeln Sie $f(\vartheta,\varphi) = \sin 2\vartheta \cos\varphi$ geschickt nach Kugelflächenfunktionen.

4. *Kopplung von Spin und Bahndrehimpuls*

Der Hilbertraum für die Kopplung von Spin und Bahndrehimpuls wird aufgespannt durch das Tensorprodukt $|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\rangle \otimes |\ell,m\rangle$, wobei $|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\rangle$ die Eigenzustände zu den Spinoperatoren $\hat{S}^2$ und $\hat{S}_3$ sind und $|\ell,m\rangle$ die Eigenzustände zu den Operatoren des Bahndrehimpulses $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_3$. Der Gesamtdrehimpuls ist $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$. Was bedeutet die Summe der Drehimpulsoperatoren $\vec{L}$ und $\vec{S}$?

a) Zeigen Sie, dass die Tensorprodukte $|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\rangle \otimes |\ell,m\rangle$ Eigenzustände zu $\hat{J}_3$ sind und geben Sie die Eigenwerte an.

b) Geben Sie den Eigenzustand zu $\hat{J}_3$ mit dem minimal möglichen Eigenwert an. Zeigen Sie, dass dieser Zustand ebenfalls ein Eigenzustand zu $\hat{J}^2$ ist und bestimmen Sie den Eigenwert.*

c) Gewinnen Sie durch Anwendung eines geeigneten Operators aus dem in b) gefundenen Zustand einen Zustand mit demselben Eigenwert bzgl. $\hat{J}^2$ und einen um $\hbar$ größeren Eigenwert zu $\hat{J}_3$.†

d) Überlegen Sie sich den dazu orthogonalen Zustand mit demselben Eigenwert zu $\hat{J}_3$. Ist dieser Zustand ein Eigenzustand zu $\hat{J}^2$? Falls ja, wie lautet der entsprechende Eigenwert?

5. *Runge-Lenz-Vektor*

Im klassischen Kepler-Problem gibt es eine Erhaltungsgröße, die als Runge-Lenz-Vektor bekannt ist. Man kann ein quantenmechanisches Analogon $\hat{\vec{F}}$ zu diesem Vektor definieren mit den Komponenten

$$\hat{F}_j = \frac{1}{2m}\sum_{k,l}\epsilon_{jkl}(\hat{p}_k\hat{L}_l - \hat{L}_k\hat{p}_l) - \frac{Ze^2}{|\hat{\vec{x}}|}\hat{x}_j.$$

a) Zeigen Sie, dass die Komponenten von $\hat{\vec{F}}$ mit dem Hamilton-Operator des Coulomb-Problems

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{|\hat{\vec{x}}|}$$

vertauschen.

b) Zeigen Sie, dass der Runge-Lenz-Vektor und der Drehimpuls senkrecht zueinander sind.

---

* *Hinweis:* Nutzen Sie die Relation $\hat{J}_+\hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_3^2 + \hbar\hat{J}_3$ aus der Vorlesung.

† *Hinweis:* Hier helfen die Relationen aus Aufgabe 2.

Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2021

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

Übungsblatt 9: Lösung

1. Verständnisfragen

a) Bei dem Zweiteilchensystem nehmen wir an, dass das Potential translationsinvariant ist. Mit anderen Worten hängt das Potential nur vom Abstand $|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$ ab. Dies erlaubt es uns, die Trägheitsbewegung des Schwerpunkts und die Relativbewegung der beiden Teilchen von einander zu trennen und durch zwei Hamilton-Operatoren zu beschreiben.

b) Die Hamilton-Operatoren der Schwerpunkts- und Relativbewegung sind

$$\hat{H}_{\mathrm{sp}} = \frac{\hat{P}^2}{2M}, \quad \hat{H}_{\mathrm{rel}} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(\hat{x}).$$

Hier haben wir den Gesamtimpuls $\hat{P} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2$, den Relativimpuls $M\hat{p} = m_2\hat{p}_1 - m_1\hat{p}_2$ und den Abstand $\hat{x} = \hat{x}_1 - \hat{x}_2$. Außerdem die Gesamtmasse $M = m_1 + m_2$ und reduzierte Masse $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$. Die Indizes 1 und 2 bezeichnen die Teilchen. Die Impulsoperatoren haben in Ortsdarstellung die gewohnte Form

$$\hat{P} = -\mathrm{i}\hbar\nabla_{\vec{X}}, \quad \hat{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla_{\vec{x}}.$$

In diesem Fall vertauschen die Hamilton-Operatoren der Schwerpunkts- und Relativbewegung, da sie von unterschiedlichen konjugierten Koordinatenpaaren abhängen. Hätte das Potential eine andere Form und würde nicht nur vom Abstand der beiden Teilchen abhängen, dann würden die Hamilton-Operatoren nicht mehr vertauschen.

c) Die radialen Eigenfunktionen haben die Form

$$u_{El}(r) = \mathrm{e}^{-\kappa\rho}\,\rho^{l+1}\sum_{s=0}^{\infty} a_s\rho^s,$$

wobei hier $\epsilon = -\kappa^2 < 0$ die Energie in Einheiten der Rydberg-Energie und $\rho = r/a_B$ der Radius in Einheiten des Bohr'schen Radius ist. Für große s verhalten sich diese Eigenfunktionen wie

$$u_{El} \simeq 2\kappa a_0\,\mathrm{e}^{\kappa\rho}\,\rho^{l+1}.$$

Dieses exponentielle Anwachsen steht im Widerspruch zu der Tatsache, dass das System einen Rand hat. Daher muss die Summe bei einem endlichen $s = s_* \in \mathbb{N}$ abbrechen. Sodass gebundene Zustände im Wasserstoffatom die Energien

$$E_n = -\frac{Z^2\mathrm{Ry}}{n^2} = -\frac{Z^2\mathrm{Ry}}{(s_* + l + 1)^2}$$

2. Herleitung der Pauli-Matrizen

Für den Operator $\hat{S}_3$ muss gerade gelten, dass

$$\hat{S}_3\,|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle\,, \qquad \hat{S}_3\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle = -\frac{\hbar}{2}\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle\,.$$

In der angegebenen Darstellung bedeutet dies

$$S_3\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_3\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \qquad S_3\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sigma_3\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \stackrel{!}{=} -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Dies ergibt sofort

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}.$$

Die Leiteroperatoren für den Spin sind $\hat{S}_\pm = \hat{S}_1 \pm \mathrm{i}\hat{S}_2$. Für $\hat{S}_+$ muss gelten, dass

$$\hat{S}_+\,|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}}\;|\tfrac{1}{2},+\tfrac{3}{2}\rangle = 0, \quad \hat{S}_+\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}}\;|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle = \hbar\,|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle.$$

In der angegebenen Darstellung bedeutet dies also

$$S_+\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_1+\mathrm{i}\sigma_2)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}, \qquad S_+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_1+\mathrm{i}\sigma_2)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}.$$

Daraus folgt sofort, dass

$$\sigma_1 + \mathrm{i}\sigma_2 = \begin{pmatrix}0 & 2\\0 & 0\end{pmatrix}.$$

Die Rechnung für $\hat{S}_-$ erfolgt analog. So muss gelten, dass

$$\hat{S}_-\,|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}}\;|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle = \hbar\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle, \quad \hat{S}_-\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}}\;|\tfrac{1}{2},-\tfrac{3}{2}\rangle = 0.$$

In der angegebenen Darstellung bedeutet dies also

$$S_-\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_1-\mathrm{i}\sigma_2)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}, \qquad S_-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_1-\mathrm{i}\sigma_2)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}.$$

Daraus folgt sofort, dass

$$\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2 = \begin{pmatrix}0 & 0\\2 & 0\end{pmatrix}.$$

Somit gilt für die restlichen beiden Pauli-Matrizen

$$\begin{aligned}
\sigma_1 &= \frac{1}{2}(\sigma_+ + \sigma_-) = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix},\\
\sigma_2 &= \frac{1}{2\mathrm{i}}(\sigma_+ - \sigma_-) = \frac{1}{\mathrm{i}}\begin{pmatrix}0 & 1\\-1 & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\\mathrm{i} & 0\end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

3. *Kugelflächenfunktionen*

a) Die gesuchten Kugelflächenfunktionen sind

$$
\begin{aligned}
Y_{22} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}\frac{0!}{4!}}\frac{(-1)^2}{2^2 2!}\frac{4!}{0!}(1-\cos^2\vartheta)^{-1}\frac{\mathrm{d}^0}{(\mathrm{d}\cos\vartheta)^0}(1-\cos^2\vartheta)^2\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\varphi} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\vartheta\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\varphi},\\
Y_{21} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}\frac{1!}{3!}}\frac{(-1)^2}{2^2 2!}\frac{3!}{1!}(1-\cos^2\vartheta)^{-1/2}\frac{\mathrm{d}^1}{(\mathrm{d}\cos\vartheta)^1}(1-\cos^2\vartheta)^2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin 2\vartheta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi},\\
Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}\frac{2!}{2!}}\frac{(-1)^2}{2^2 2!}\frac{2!}{2!}(1-\cos^2\vartheta)^{0}\frac{\mathrm{d}^2}{(\mathrm{d}\cos\vartheta)^2}(1-\cos^2\vartheta)^2 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\vartheta-1),\\
Y_{2,-1} &= (-1)^1 Y_{21}^* = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin 2\vartheta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi},\\
Y_{30} &= \sqrt{\frac{7}{4\pi}\frac{3!}{3!}}\frac{(-1)^3}{2^3 3!}\frac{3!}{3!}(1-\cos^2\vartheta)^{0}\frac{\mathrm{d}^3}{(\mathrm{d}\cos\vartheta)^3}(1-\cos^2\vartheta)^3 = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}(5\cos^3\vartheta-3\cos\vartheta)
\end{aligned}
$$

b) Es gilt zu zeigen, dass

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\pi}\mathrm{d}\vartheta\,\sin\vartheta\,Y_{\ell m}^*(\vartheta,\varphi)\,Y_{\ell' m'}(\vartheta,\varphi) = 0.$$

Falls $m \neq m'$, dann

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-m')\varphi} = 0.$$

Es bleibt also nur noch zu zeigen, dass $Y_{20} \perp Y_{30}$. Integration über φ ergibt gerade einen Faktor 2π. Bleibt also noch die Integration über ϑ (unter Vernachlässigung der Vorfaktoren). Mit der Substitution $z = \cos\vartheta$ und $\mathrm{d}\vartheta\,\sin\vartheta = -\mathrm{d}(\cos\vartheta)$ ergibt sich

$$
\begin{aligned}
\int_0^{\pi}\mathrm{d}\vartheta\,\sin\vartheta\,(3\cos^2\vartheta-1)(5\cos^3\vartheta-3\cos\vartheta) &= \int_{-1}^{1}\mathrm{d}z\,(3z^2-1)(5z^3-3z)\\
&= \int_{-1}^{1}\mathrm{d}z\,(15z^5-14z^3+3z) = 0,
\end{aligned}
$$

da das Integrationsinvervall symmetrisch bzgl. der Null ist, der Integrand aber antisymmetrisch.

c) Da

$$Y_{2,-1} - Y_{21} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin 2\vartheta\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\right) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin 2\vartheta\cos\varphi$$

ist, ist somit

$$f(\vartheta,\varphi) = \sin 2\vartheta\cos\varphi = \sqrt{\frac{8\pi}{15}}\,(Y_{2,-1}-Y_{21})\,.$$

4. *Kopplung von Spin und Bahndrehimpuls*

a) $\hat{J}_3$ angewandt auf $|\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle\otimes|\ell,m\rangle$ ergibt

$$
\begin{aligned}
\hat{J}_3\,|\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle\otimes|\ell,m\rangle &= (\hat{S}_3\otimes\hat{I}+\hat{I}\otimes\hat{L}_3)\,|\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle\otimes|\ell,m\rangle\\
&= \pm\frac{\hbar}{2}\,|\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle\otimes|\ell,m\rangle + \hbar m\,|\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle\otimes|\ell,m\rangle\\
&= \hbar\left(m\pm\frac{1}{2}\right)|\tfrac{1}{2},\pm\tfrac{1}{2}\rangle\otimes|\ell,m\rangle\,.
\end{aligned}
$$

Die Eigenwerte sind demnach $\hbar\left(m\pm\tfrac{1}{2}\right)$.

b) Wegen $-j \leq j_3 \leq j$ ist der minimal mögliche Eigenwert $-\ell - \frac{1}{2}$. Der zugehörige Eigenzustand ist nach Aufgabe a) dann $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle$. Benutze im Folgenden, dass $\hat{J}^2 = \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3$. Damit gilt, dass

$$\begin{aligned}
\hat{J}^2 |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle &= (\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3) |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle \\
&= \Big[(\hat{S}_+ \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{L}_+)(\hat{S}_- \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{L}_-) + \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3\Big] |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle \\
&= \Big[\underbrace{(\hat{S}_+ \otimes \hat{I})(\hat{S}_- \otimes \hat{I}) + (\hat{S}_+ \otimes \hat{I})(\hat{I} \otimes \hat{L}_-) + (\hat{I} \otimes \hat{L}_+)(\hat{S}_- \otimes \hat{I}) + (\hat{I} \otimes \hat{L}_+)(\hat{I} \otimes \hat{L}_-)}_{=0 \quad \text{da } \hat{S}_- \text{ und } \hat{L}_- \text{ angewandt auf } |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle \text{ Null ergeben}} \\
&\quad + \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3\Big] |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle \\
&= \hbar^2 \left[\left(-l - \frac{1}{2}\right)^2 - \left(-l - \frac{1}{2}\right)\right] |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle \\
&= \hbar^2 \left(\ell + \frac{1}{2}\right)\left(\ell + \frac{3}{2}\right) |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle \,.
\end{aligned}$$

Der zu $\hat{J}^2$ gehörige Eigenwert ist demnach $\hbar^2 \left(\ell + \frac{1}{2}\right)\left(\ell + \frac{3}{2}\right)$. Folglich hat der Zustand $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle$ also den Gesamtdrehimpuls $j = \left(\ell + \frac{1}{2}\right)\hbar$.

c) Wende den Leiteroperator $\hat{J}_+$ auf den Zustand $|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle$ an. Dies ergibt

$$\begin{aligned}
\hat{J}_+ |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle &= (\hat{S}_+ \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{L}_+) |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle \\
&= \hbar \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}} |\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle + \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) + \ell(-\ell+1)} |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell+1\rangle \\
&= \hbar |\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle + \hbar \sqrt{2\ell} |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell+1\rangle \equiv |\psi\rangle \,.
\end{aligned}$$

Dies ist ein Eigenzustand zu $\hat{J}_3$, denn mit Hilfe von Teilaufgabe a) ergibt sich

$$\begin{aligned}
\hat{J}_3 |\psi\rangle &= \hbar\hat{J}_3 |\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle + \hbar \sqrt{2\ell}\hat{J}_3 |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell+1\rangle \\
&= \hbar^2 \left(-\ell + \frac{1}{2}\right) |\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle + \hbar^2 \sqrt{2\ell} \left(-\ell + 1 - \frac{1}{2}\right) |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell+1\rangle \\
&= \hbar \left(-\ell + \frac{1}{2}\right) |\psi\rangle \,.
\end{aligned}$$

Der Zustand $|\psi\rangle$ hat denselben Eigenwert bzgl. $\hat{J}^2$, denn $[\hat{J}_+, \hat{J}^2] = 0$.

d) Der orthogonale Eigenzustand zu $|\psi\rangle$ mit demselben Eigenwert zu $\hat{J}_3$ ist gerade der Zustand

$$|\phi\rangle = \hbar \sqrt{2\ell} |\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle - \hbar |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell+1\rangle \,,$$

denn

$$\langle \phi \,|\, \psi \rangle = \hbar^2 \sqrt{2\ell} - \hbar^2 \sqrt{2\ell} = 0$$

und

$$\begin{aligned}
\hat{J}_3 |\phi\rangle &= \hbar \sqrt{2\ell}\hat{J}_3 |\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle - \hbar\hat{J}_3 |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell+1\rangle \\
&= \hbar^2 \sqrt{2\ell} \left(-\ell + \frac{1}{2}\right) |\tfrac{1}{2}, +\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell\rangle - \hbar^2 \left(-\ell + 1 - \frac{1}{2}\right) |\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell, -\ell+1\rangle \\
&= \hbar \left(-\ell + \frac{1}{2}\right) |\phi\rangle \,.
\end{aligned}$$

Wende zuerst $\hat{J}_-$ auf $|\phi\rangle$ an. Dann ergibt sich

$$\begin{aligned}
\hat{J}_- |\phi\rangle &= (\hat{S}_- \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{L}_-)\Big(\hbar\sqrt{2\ell}\,|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell,-\ell\rangle - \hbar\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell,-\ell+1\rangle\Big) \\
&= \hbar\sqrt{2\ell}\,(\hat{S}_- \otimes \hat{I})\,|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell,-\ell\rangle - \hbar\,(\hat{I} \otimes \hat{L}_-)\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell,-\ell+1\rangle \\
&= \hbar^2\sqrt{2\ell}\sqrt{\frac{3}{2}\cdot\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{2}}\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell,-\ell\rangle - \hbar^2\sqrt{\ell(\ell+1)-(\ell-1)\ell}\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell,-\ell\rangle \\
&= \hbar^2\sqrt{2\ell}\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell,-\ell\rangle - \hbar^2\sqrt{2\ell}\,|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\ell,-\ell\rangle = 0.
\end{aligned}$$

$\hat{J}^2$ angewandt auf $|\phi\rangle$ ergibt dann

$$\hat{J}^2 |\phi\rangle = (\underbrace{\hat{J}_+\hat{J}_-}_{=0} + \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3)\,|\phi\rangle = \hbar^2\left(-\ell+\frac{1}{2}\right)^2 - \hbar^2\left(-\ell+\frac{1}{2}\right)|\phi\rangle = \hbar^2\left(\ell-\frac{1}{2}\right)\left(\ell+\frac{1}{2}\right)|\phi\rangle\,.$$

$|\phi\rangle$ ist also ein Eigenzustand zu $\hat{J}^2$ mit dem Eigenwert $\hbar^2\left(\ell-\frac{1}{2}\right)\left(\ell+\frac{1}{2}\right)$, d.h. also, $|\phi\rangle$ hat den Gesamtdrehimpuls $j = \left(\ell-\frac{1}{2}\right)\hbar$.

5. *Runge-Lenz-Vektor*

a) Wir wollen den Kommutator zwischen den Komponenten vom Runge-Lenz-Vektor und dem Hamilton-Operator berechnen. Wir benutzen in der Lösung die Einstein'sche Summenkonvention, sodass über sich wiederholende Indizes summiert wird.

$$\begin{aligned}
[\hat{F}_j, H] &= \left[\hat{F}_j, \frac{\hat{p}^2}{2m}\right] - Ze^2\left[\hat{F}_j, \frac{1}{r}\right] \\
&= \frac{1}{4m^2}\epsilon_{jkl}\left[\hat{p}_k\hat{L}_l - \hat{L}_k\hat{p}_l, \hat{p}^2\right] && (1) \\
&\quad - \frac{Ze^2}{2m}\left[\frac{x_j}{r}, \hat{p}^2\right] && (2) \\
&\quad - \frac{Ze^2}{2m}\epsilon_{jkl}\left[\hat{p}_k\hat{L}_l - \hat{L}_k\hat{p}, \frac{1}{r}\right] && (3) \\
&\quad + Z^2e^4\left[\frac{x_j}{r}, \frac{1}{r}\right] && (4)
\end{aligned}$$

Zuerst fällt auf, dass Term (4) verschwindet, weil die Operatoren Funktionen des Ortsoperators sind und Ortsoperatoren vertauschen. Term (1) verschwindet ebenso, weil der Operator $\hat{p}^2$ sowohl mit dem Impulsoperator $\hat{p}_i$ als auch mit dem Drehimpulsoperator $\hat{L}_i$ vertauscht. Um das einzusehen betrachten wir

$$\begin{aligned}
\left[\hat{p}_k\hat{L}_l, \hat{p}^2\right] &= \hat{p}_k\left[\hat{L}_l, \hat{p}^2\right] + \underbrace{\left[\hat{p}_k, \hat{p}^2\right]}_{=0}\hat{L}_l = \hat{p}_k\left[\hat{L}_l, \hat{p}_i\hat{p}_i\right] = \hat{p}_k\left(\hat{p}_i\left[\hat{L}_l, \hat{p}_i\right] + \left[\hat{L}_l, \hat{p}_i\right]\hat{p}_i\right) \\
&= \mathrm{i}\hbar\hat{p}_k\epsilon_{lim}\,(\hat{p}_i\hat{p}_m + \hat{p}_m\hat{p}_i) = \mathrm{i}\hbar\hat{p}_k\epsilon_{lim}\,(\hat{p}_i\hat{p}_m - \hat{p}_i\hat{p}_m) = 0.
\end{aligned}$$

Analog kann diese Rechnung für $[\hat{L}_k\hat{p}_l, \hat{p}^2] = 0$ ausgeführt werden. Dann bleiben noch die Terme (2) und (3) auszuwerten. Dazu bemerken wir zunächst, dass der Kommutator $[\hat{\vec{F}}, \hat{H}] = 0$ ist, wenn die Komponenten $\hat{F}_j$ mit dem Hamilton-Operator vertauschen. Wir schreiben nun in Kugelkoordinaten

$$\hat{\vec{p}}^2 = -\hbar^2\left(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r\right) + \frac{\hat{\vec{L}}^2}{r^2}$$

Term (2) ist der Kommutator des Einheitsvektors in radialer Richtung mit $\hat{\vec{p}}^2$. Da die Ableitung nach dem Radius mit diesem Einheitsvektor vertauscht, reduziert sich dieser Kommutator zu

$$\left[\frac{\hat{\vec{x}}}{r}, \hat{\vec{p}}^2\right] = \frac{1}{r^3}\left[\hat{\vec{x}}, \hat{\vec{L}}^2\right] = \frac{1}{r^3}\left(\hat{\vec{L}} \cdot \left[\hat{\vec{x}}, \hat{\vec{L}}\right] + \left[\hat{\vec{x}}, \hat{\vec{L}}\right] \cdot \hat{\vec{L}}\right),$$

wobei wir genutzt haben, dass der Drehimpulsoperator mit $\hat{\vec{x}} \cdot \hat{\vec{x}}$ vertauscht. Dies lässt sich analog zu $[\hat{L}_i, \hat{p}^2] = 0$ nachprüfen. Als nächstes benutzen wir den Kommutator, den Sie in der Vorlesung gezeigt haben

$$[\hat{L}_i, \hat{x}_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}x_k$$

und finden

$$\frac{1}{r^3}\left[\hat{\vec{x}}, \hat{\vec{L}}^2\right] = \frac{\mathrm{i}\hbar}{r^3}\left(\hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{x}} - \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{L}}\right)$$

für Term (2).

In Term (3) bemerken wir wieder Terme, die den Kommutator $\left[\hat{\vec{L}}, \frac{1}{r}\right] = 0$ enthalten. Dann ergibt sich

$$\left[\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{p}}, \frac{1}{r}\right] = \left[\hat{\vec{p}}, \frac{1}{r}\right] \times \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{L}} \times \left[\hat{\vec{p}}, \frac{1}{r}\right].$$

Um diesen Kommutator auszurechnen bemerken wir, dass $\hat{\vec{p}}$ im ersten Term sowohl auf r^{-1} als auch die Wellenfunktion wirkt. Also

$$\left[\hat{\vec{p}}, \frac{1}{r}\right] = \hat{\vec{p}}\frac{1}{r} - \frac{1}{r}\hat{\vec{p}} = -\mathrm{i}\hbar\left(\nabla\frac{1}{r}\right) = \mathrm{i}\hbar\frac{\vec{x}}{r^3}.$$

Dann ist Term (3) proportional zu

$$\left[\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{p}}, \frac{1}{r}\right] = \frac{\mathrm{i}\hbar}{r^3}\left(\hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{x}}\right).$$

Also heben sich Term (2) und Term (3) gerade auf. ✓

b) Zuletzt zeigen wir, dass der Runge-Lenz-Vektor und der Drehimpulsvektor senkrecht zueinander sind. Da beide Operatoren hermitesch sind, gilt

$$\left(\hat{\vec{F}} \cdot \hat{\vec{L}}\right)^\dagger = \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{F}}$$

und wir müssen nur zeigen, dass $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{F}} = 0$ gilt.

Wir schreiben dazu $\hat{\vec{F}}$ um zu

$$\begin{aligned}
\hat{\vec{F}} &= \frac{1}{2m}\left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}} - \hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{p}}\right) - \frac{Ze^2}{r}\hat{\vec{x}} \\
&= \frac{1}{2m}\epsilon_{ijk}\left(\hat{p}_j\hat{L}_k - \hat{L}_j\hat{p}_k\right) - \frac{Ze^2}{r}\hat{\vec{x}} \\
&= \frac{1}{2m}\epsilon_{ijk}\left(\hat{p}_j\hat{L}_k - \mathrm{i}\hbar\epsilon_{jkm}\hat{p}_m - \hat{p}_k\hat{L}_j\right) - \frac{Ze^2}{r}\hat{\vec{x}} \\
&= \frac{1}{2m}\left(2\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}} + \mathrm{i}\hbar(\delta_{ij}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jj})\hat{p}_m\right) - \frac{Ze^2}{r}\hat{\vec{x}} \\
&= \frac{1}{m}\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}} - \frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\hat{\vec{p}} - \frac{Ze^2}{r}\hat{\vec{x}}.
\end{aligned}$$

Dann werten wir die Skalarprodukte aus:

$$\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{p}} = \epsilon_{ijk}\hat{x}_i\hat{p}_j\hat{p}_k = \hat{\vec{x}} \cdot \left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{p}}\right) = 0$$

$$\hat{\vec{L}} \cdot \left(\hat{\vec{p}} \times \hat{\vec{L}}\right) = \epsilon_{ijk} \hat{L}_i \hat{p}_j \hat{L}_k = \epsilon_{ijk} \left(\mathrm{i}\hbar \epsilon_{jkm} \hat{L}_i \hat{p}_m + \hat{L}_i \hat{L}_k \hat{p}_j\right) = 2\mathrm{i}\hbar \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{p}} - \left(\hat{\vec{L}} \times \hat{\vec{L}}\right) \cdot \hat{\vec{p}} = 0$$

$$\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{x}} = \epsilon_{ijk} \hat{x}_i \hat{p}_j \hat{x}_k = \epsilon_{ijk} \left(\hat{x}_i \hat{x}_k \hat{p}_j - \hat{x}_i \left[\hat{x}_k, \hat{p}_j\right]\right) = \epsilon_{ijk} \hat{x}_i \hat{x}_k \hat{p}_j - \mathrm{i}\hbar \epsilon_{ijk} \delta_{kj} x_i = 0$$

Wir haben hier benutzt, dass das Kreuzprodukt von zueinander parallelen Vektoren und das Skalarprodukt von zueinander senkrechten Vektoren verschwindet.