Theo 13

Michael Kopp

2

(a) Bem.: $\underline{S}$ ist ~~abstrakt~~ ein Vektor von Matrizen, $\underline{B}$ ist ein Vektor dreier Skalare; $\underline{B}\,\underline{S}$ ist dann eine Summe dreier Matrizen mit „Vorfaktor" B_x, B_y, B_z.

Damit vertauschen beliebige Komponenten von $\underline{B}$ und $\underline{S}$: $[B_i, S_j] = 0$. (*)

Der Zeitentwicklungsoperator sei $U = U(t)$ mit $U^{-1} = U^{+}$.

$$\frac{1}{i\hbar}[\underline{S}_H, H_H] = \frac{1}{i\hbar}[U^{+}\underline{S}U, U^{+}\gamma\,\underline{B}\,\underline{S}\,U]$$

Betrachte i-te Komponente dieser Vektorgleichung (beachte: Einsteinsummation über zwei gleiche Indices):

$$\frac{1}{i\hbar}[S^i_H, H_H] = \frac{1}{i\hbar}\Big(U^{+}S^i\underbrace{U U^{+}}_{\mathbb{1}}\gamma B_j S^j U - U^{+}\gamma B_j S^j \underbrace{U U^{+}}_{\mathbb{1}} S^i U\Big)$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\gamma U^{+}\left(S^i B_j S^j - B_j S^j S^i\right)U$$

Skalar B_j darf mit Matrizen S bel. vertauscht werden; siehe (*)

$$\underset{(*)}{=} \frac{1}{i\hbar}\gamma U^{+}\underbrace{(S^i S^j - S^j S^i)}_{[S^i, S_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk} S_k} B_j U$$

$$= U^{+}\gamma\,\varepsilon_{ijk} S_k B_j U = U^{+}\gamma\,\varepsilon_{ijk} B_j S_k U$$

$$= \varepsilon_{ijk}\gamma\underbrace{U^{+}S_k U}_{S^k_H}\underbrace{B_j}_{B_j = B_j(t)}.$$

Dies ist also die i-te Komponente des Kreuzprodukts.

Dies zeigt das zweite „="; das erste „=" ist nicht zu zeigen, weil es sich um die (allg. gültige) Heisenberggl. im Heisenbergbild handelt.

2

(b) $\dot{\underline{S}} = \gamma\, \underline{S} \times \underline{B}$, $\underline{B} = \begin{pmatrix} B_1 \cos\omega t \\ B_1 \sin\omega t \\ B_0 \end{pmatrix}$, $\underline{S} = \begin{pmatrix} S_x \\ S_y \\ S_z \end{pmatrix}$

$$\dot{S}_x = \gamma\,(B_0 S_y - S_z B_1 \sin\omega t)$$
$$\dot{S}_y = \gamma\,(-B_0 S_x + S_z B_1 \cos\omega t)$$
$$\dot{S}_z = \gamma\,(-S_y B_1 \cos\omega t + S_x B_1 \sin\omega t)$$

$$\dot{\underline{S}} = \gamma \cdot \underline{\underline{A}} \cdot \underline{S} \quad \text{mit} \quad \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} 0 & B_0 & -B_1 \sin\omega t \\ -B_0 & 0 & B_1 \cos\omega t \\ B_1 \sin\omega t & -B_1 \cos\omega t & 0 \end{pmatrix}$$

Dies ist eine lineare DGL 1. Ordnung mit variablen Koeffizienten; die Lösung ist gegeben durch

$$\underline{S} = \gamma \exp\left(\int_0^t \underline{A}(\tau)\, d\tau \right) \cdot \underline{S}_0 \,,$$

wobei $\underline{S}_0$ dann das AWP beinhaltet.

1. Best. $\int_0^t A(\tau)\, d\tau =: B$

$$B = \begin{pmatrix} 0 - i\sqrt{\Gamma} & B_0 t & \frac{B_1}{\omega}(\cos\omega t - 1) \\ -B_0 t & 0 - i\sqrt{\Gamma} & \frac{B_1}{\omega} \sin\omega t \\ -\frac{B_1}{\omega}(\cos\omega t - 1) & -\frac{B_1}{\omega} \sin\omega t & 0 - i\sqrt{\Gamma} \end{pmatrix}$$

2. Best. EW

$$\det(B - \lambda \mathbb{1}) = -\lambda^3 - B_0 t \left(\frac{B_1}{\omega}\right)^2 \cancel{(\cos\omega t - 1)} \sin\omega t + B_0 t \left(\frac{B_1}{\omega}\right)^2 \cancel{(\cos\omega t - 1)} \sin\omega t$$
$$- \lambda \left(\frac{B_1}{\omega}\right)^2 (\cos\omega t - 1)^2 - \lambda \left(\frac{B_1}{\omega}\right)^2 \sin^2\omega t - \lambda (B_0 t)^2$$
$$= -\lambda^3 - \lambda \Big(\underbrace{\left(\frac{B_1}{\omega}\right)^2 + (B_0 t)^2 - 2\left(\frac{B_1}{\omega}\right)^2 \cos\omega t}_{=:\ \Gamma\ =\ \Gamma(t).} \Big)$$

$$\lambda_0 = 0 \,, \quad \lambda_{1/2} = \pm\sqrt{-\Gamma} = \pm i \sqrt{\Gamma}$$

$\Rightarrow$ B ist diagonalisierbar, da wir 3 EW haben!

3. Best. EV:

Die Matrix B hat offensichtlich $\det B = 0$, also dürfen wir bei der Suche nach EV eine Komponente (einen Freiheitsgrad) vorgeben.

3 [korr.]

Sei ein Eigenvektor zu B: $\underline{v} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$.

$\underline{\lambda = 0}$ Wähle $c = 1 \Rightarrow \quad b \cdot B_0 t + 1 \cdot \frac{B_1}{\omega}(\cos\omega t - 1) = 0$

$$\Rightarrow b = - \frac{\frac{B_1}{\omega}(\cos\omega t - 1)}{B_0 t}$$

$$-a B_0 t + 1 \cdot \frac{B_1}{\omega} \sin\omega t = 0 \Rightarrow a = \frac{B_1 \sin\omega t}{B_0 \omega t}$$

(Zum Testen kann man diese Werte in die letzte Gl. einsetzen (unterste Zeile) und erhält die wahre Aussage $0 = 0$.)

$\underline{\lambda_1 = i\sqrt{\Gamma}}$ wähle $c = 1$ ~~⇒ …~~, $\sqrt{\Gamma} =: \Delta$ $\quad (\lambda = i\Delta)$

$$-a i\Delta + b B_0 t + \frac{B_1}{\omega}(\cos\omega t - 1) = 0$$

$$-a B_0 t - b i\Delta + \frac{B_1}{\omega} \sin\omega t = 0 \qquad \Big| \cdot \frac{i\Delta}{B_0 t} \quad \ominus$$

$$-a i\Delta + b \frac{\Delta^2}{B_0 t} + \frac{B_1 \sin\omega t \cdot i\Delta}{\omega B_0 t} = 0$$

$$b\left(B_0 t - \frac{\Delta^2}{B_0 t}\right) + \frac{B_1}{\omega}\left((\cos\omega t - 1) - \frac{i\Delta \sin\omega t}{B_0 t}\right) = 0$$

$$b = \frac{B_1}{\omega}\left[\frac{i\Delta \sin\omega t}{B_0 t} - (\cos\omega t - 1)\right] \Big/ \left(B_0 t - \frac{\Delta^2}{B_0 t}\right)$$

$$a = \frac{b i\Delta - \frac{B_1}{\omega}\sin\omega t}{B_0 t}$$

$\underline{\lambda_2 = -i\sqrt{\Gamma} = -i\Delta}$ wähle wieder $c = 1$; das „$-$", um das sich λ bzgl. der vorhergehenden Rechnung geändert hat, kann man in das Δ „stecken", also $\tilde{\Delta} = -\Delta$ setzen, dann ist der EW $\lambda_2 = i\tilde{\Delta}$. Man erhält den zugeh. EV, indem man im ~~obigen~~ oben bestimmten

$$\Delta \longmapsto -\Delta$$ ersetzt.

4. Transformation:

Die EV, deren Komponenten oben ausgerechnet wurden seien $\underline{v}_0, \underline{v}_1, \underline{v}_2$ (jew. zu den EW $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$).

[3] Forts.

Setze $T := (\underline{v}_1\ \underline{v}_2\ \underline{v}_3)$, dann ist T die Transformationsmatrix, die B diagonalisiert:

$$\bar{T}^T B\, T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\sqrt{\pi} & 0 \\ 0 & 0 & -i\sqrt{\pi} \end{pmatrix} =: D \qquad (\bar{T} : \text{komplex konj.})$$

Damit bestimmt sich $\exp(B)$ via

$$B = T D \bar{T}^T \Rightarrow \exp(B) = T \exp(D)\, \bar{T}^T,$$

wobei

$$\exp(D) = \begin{pmatrix} e^0 & & \\ & e^{i\sqrt{\pi}} & \\ & & e^{-i\sqrt{\pi}} \end{pmatrix}$$

ist.

Eine äußerst langwierige, fehleranfällige, hässliche Rechnung liefert schließlich

$$\exp(B) = \begin{pmatrix} 1 & \exp(B_0 t) & \exp \frac{B_1}{\omega}(\cos\omega t - 1) \\ \exp(-B_0 t) & 1 & \exp\left(\frac{B_1}{\omega} \sin\omega t\right) \\ \exp\left[-\frac{B_1}{\omega}\left(\cos\omega t - 1\right)\right] & \exp\left(-\frac{B_1}{\omega}\sin\omega t\right) & 1 \end{pmatrix}.$$

Zudem hat man für die Lösung drei Konstanten

$$\mu, \nu, \sigma \leftrightarrow \underline{S}_0 := \begin{pmatrix} \mu \\ \nu \\ \sigma \end{pmatrix}.$$

Die ~~End~~ endgültige Lösung ist:

$$\underline{S} = \gamma \cdot \exp(B) \cdot S_0 .$$

[3]

(a) Im Grundzustand, Ortsraum, sphärische Koordinaten:

$$|100\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} = \psi(r,\varphi,\vartheta).$$

Impulsquadrat im Ortsraum: $p^2 = -\hbar^2 \Delta$

Δ in Kugelkoord. (relevanter Teil (von r abh.))

$$\Delta\psi = \frac{1}{r}\cdot \partial_r^2 (r\psi)$$

$$\langle p^2 \rangle = -\int d^3r \; \psi^* \hbar^2 \Delta \psi$$

$$\Delta\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^7}}\left(1 - 2a_0\frac{1}{r}\right) e^{-r/a_0} \qquad \psi^* = \psi \quad (\text{da } \psi \in \mathbb{R})$$

$$d^3r = r^2 \sin\vartheta \, dr\, d\varphi\, d\vartheta$$

$$\langle p^2 \rangle = -\frac{1}{\pi a_0^5}\hbar^2 \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{2\pi} \underbrace{\int_0^{\pi} \sin\vartheta \, d\vartheta}_{2} \int_0^\infty dr \left(r^2 - 2a_0 r\right) e^{-2r/a_0}$$

$$\int_0^\infty dr\; r^2 e^{-2r/a_0} = \left[-\frac{a_0}{2} r^2 e^{-2r/a_0}\right]_0^\infty + \int_0^\infty dr\; \cancel{\tfrac{2}{2}} r\, a_0\, e^{-2r/a_0}$$

$$\int_0^\infty dr\; a_0 r e^{-2r/a_0} = \left[-\frac{1}{2}a_0^2\, r e^{-2r/a_0}\right]_0^\infty + \int_0^\infty dr\; \frac{1}{2}a_0^2 e^{-2r/a_0}$$

$$\int_0^\infty dr\; \frac{1}{2}a_0^2 e^{-2r/a_0} = \left[-\frac{1}{4}a_0^3 e^{-2r/a_0}\right]_0^\infty = 0 + a_0^3/4$$

$$\int -2a_0 r e^{-2r/a_0} = -\frac{a_0^3}{2}$$

$$\langle p^2 \rangle = -\frac{1}{\cancel{\pi} a_0^5}\hbar^2\, 4\cancel{\pi}\, a_0^3 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{2}\right) = \frac{\hbar^2}{a_0^2}$$

Mit
$m_e \approx 911 \cdot 10^{-33}$ kg
$a_0 \approx 52{,}9 \cdot 10^{-12}$ m
$\hbar \approx 105 \cdot 10^{-36}$ Js
$c_0 \approx 300 \cdot 10^{6}\ \frac{m}{s}$

$$\frac{\sqrt{\langle p^2 \rangle}}{m} / c_0 \approx 7{,}297 \cdot 10^{-3} \approx \alpha$$

$$\frac{1}{137} \approx 7{,}299 \cdot 10^{-3}$$

Bem: Die Randterme der part. Integrationen verschwinden, weil e^{-2r} schneller fällt als r^2 steigt:

$$r^2 e^{-2r} = \frac{r^2}{e^{2r}} \longrightarrow \frac{\infty}{\infty} \text{ mit S.v. L'Hôpital: } \frac{2r}{2e^{2r}} \longrightarrow \frac{2}{4e^{2r}} \longrightarrow 0$$

für $r \to \infty$.

(b) Für uns: $H = H_0 \underbrace{- \frac{1}{2mc^2}\left(\frac{p^2}{2m}\right)^2}_{H'}$

Aus (λ^2): $(H_0 - E_0)|\psi_1\rangle = (E_1 - H')|\psi_0\rangle$ ergibt sich nach Anwenden von $\langle\psi_0|$: $E_1 = \langle\psi_0|H'|\psi_0\rangle$. Dies ist zu berechnen:

$$\langle\psi_0|H'|\psi_0\rangle = -\frac{1}{2mc^2}\langle\psi_0|(H_0 + \frac{e^2}{r})\cdot(H_0 + \frac{e^2}{r})|\psi_0\rangle$$

Da r und H selbstadjungiert sind (Bem.: r ist Observable), ist dies identisch mit

$$-\frac{1}{2mc^2}\,\|(H_0 + \frac{e^2}{r})|\psi_0\rangle\|^2.$$

Da $|\psi_0\rangle$ Lös. von H_0 ist, gilt $H_0|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle$ mit $E_0 = -E_R \simeq -13{,}605\,eV$. Im Ortsraum ist $\frac{1}{r}$ als Operator lediglich die Multiplikation mit der Wellenfunkt. und der Betrag berechnet sich nach

$$\||\varphi\rangle\|^2 = \int d^3r\; \varphi^* \cdot \varphi .$$

$$(H_0 + \frac{e^2}{r})|\psi_0\rangle = -E_R|\psi_0\rangle + \frac{e^2}{r}\cdot|\psi_0\rangle \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\left(-E_R + \frac{e^2}{r}\right)e^{-r/a_0}$$

$$\|(H_0 + \frac{e^2}{r})|\psi_0\rangle = \int d^3r\, \frac{1}{\pi a_0^3}\left(-E_R + \frac{e^2}{r}\right)^2 e^{-2r/a_0}$$

$$= \frac{4\pi}{\pi\cdot a_0^3}\int_0^\infty dr\left[E_R^2\cdot r^2 - 2E_R e^2 r + e^4\right]e^{-2r/a_0} \qquad (\text{Vgl (a)})$$

$$= \frac{4\cancel{\pi}}{\cancel{\pi} a_0^3}\left[E_R^2\,\frac{a_0^3}{4} - 2E_R e^2\,\frac{a_0^2}{4} + e^4\cdot\frac{a_0}{2}\right]$$

$$\Rightarrow E_1 = -\frac{1}{2mc^2}\left(E_R^2 - 2E_R\frac{e^2}{a_0} + 2\frac{e^4}{a_0^2}\right)$$

komisch: Einheiten passen nicht...

(c) Es ist jetzt $|\psi_0\rangle$ nicht notwendigerweise $|100\rangle$, sondern $|n\,l\,m\rangle$.

Dann ist E_1: $\quad (\langle\varphi\rangle = \langle nlm|\varphi|nlm\rangle)$

$$\frac{-1}{2mc^2}\langle nlm|\left(H_0 + \frac{e^2}{r}\right)^2|nlm\rangle = \frac{-1}{2mc^2}\left(E_n^2 + 2E_n e^2\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle + e^4\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle\right)$$

mit $E_n = -E_R/n^2 \quad \left\langle\frac{1}{r}\right\rangle = 1/n^2 a_0 \quad \left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle = 1/m^2 a_0^4 e^4 n^3 \left(\frac{1}{l+1/2}\right)$

$$E_1 = \frac{-1}{2mc^2}\left(\frac{E_R^2}{n^4} \cancel{+} - \frac{2E_R e^2}{a_0 n^2} + \frac{1}{m^2 a_0^4 n^3 (l+1/2)}\right)$$