Theoretische Physiq II
für Lehramtsstudenten
WS 2005/06

Vorlesunq: Michael Flohr
Übunqen: Christian Sämann
Übunqsleitunq: Kirsten Vogeler

Qlausur

(Lösunqssqizze)

1. *Korrespondenzprinzip*: **[1+1+1 = 3 P.]**
   Nach dem Korrespondenzprinzip ordnet man den Observablen
   für die Energie $E \mapsto \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, [1 P.]
   für den Impuls $\vec{p} \mapsto -\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}$, und [1 P.]
   für den Drehimpuls $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} \mapsto -\mathrm{i}\hbar\vec{x} \times \vec{\nabla}$ oder, wenn man berücksichtigt, dass in der Quantenmechanik die Operatoren für Ort und Impuls nicht kommutieren, in symmetrisierter Form $\vec{L} = \frac{1}{2}(\vec{x} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{x}) \mapsto -\mathrm{i}\hbar\frac{1}{2}(\vec{x} \times \vec{\nabla} - \vec{\nabla} \times \vec{x})$ [1 P.]
   als Operatoren zu, wenn im Ortsraum gearbeitet wird.

2. *Kontinuitätsgleichung*: **[1+1+3 = 5 P.]**
   Die Kontinuitätsgleichung lautet $\dot{\rho}(\vec{x},t) = \mathrm{div}\vec{j}(\vec{x},t)$. [1 P.]
   Sie besagt, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\rho(\vec{x},t) = \bar{\Psi}(\vec{x},t)\Psi(\vec{x},t)$$

   erhalten ist. Wenn sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit an einem Ort $\vec{x}$ mit der Zeit t ändert, so ist diese Änderung gleich des Flusses von Wahrscheinlichkeit durch die Oberfläche einer kleinen Kugel um den Punkt $\vec{x}$ herum. Dieser Fluss ist gegeben durch den Strom

$$j(\vec{x},t) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\bar{\Psi}(\vec{x},t)(\vec{\nabla}\Psi(\vec{x},t)) - (\vec{\nabla}\bar{\Psi}(\vec{x},t))\Psi(\vec{x},t)\right) .$$

   Wahrscheinlichkeit verhält sich in der Quantenmechanik also wie eine Flüssigkeit. [1 P.]
   Zur Herleitung betrachtet man die von links mit $\bar{\Psi}(\vec{x},t)$ multiplizierte Schrödinger-Gleichung sowie das komplex Konjugierte dieses Ausdrucks. Zieht man diese beiden voneinander ab, so erhält man

$$\begin{aligned}
\bar{\Psi}(\vec{x},t)\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi(\vec{x},t) &= \bar{\Psi}(\vec{x},t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla})^2 + V(\vec{x})\right)\Psi(\vec{x},t) \\
\Psi(\vec{x},t)\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\bar{\Psi}(\vec{x},t) &= \Psi(\vec{x},t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla})^2 + V(\vec{x})\right)\bar{\Psi}(\vec{x},t) \\
(-)\quad & \\
\hline
\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\bar{\Psi}(\vec{x},t)\Psi(\vec{x},t)\right) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\bar{\Psi}(\vec{x},t)((\vec{\nabla})^2\Psi(\vec{x},t)) - ((\vec{\nabla})^2\bar{\Psi}(\vec{x},t))\Psi(\vec{x},t)\right) .
\end{aligned}$$

   In der letzten Gleichung steht links bereits die zeitliche Ableitung der Wahrscheinlichkeitsdichte. Rechts müssen wir den Ausdruck noch als Divergenz von etwas schreiben, was dann den Wahrscheinlichkeitsstrom gibt. Am besten prüft man durch direktes Nachrechnen nach, dass $-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}j(\vec{x},t)$ mit dem oben angegebenen Strom $j(\vec{x},t)$ genau die rechte Seite ergibt, da sich die Terme der Form $(\vec{\nabla}\bar{\Psi})(\vec{\nabla}\Psi)$ gerade wegheben. [3 P.]

3. *Harmonischer Oszillator – Ansatz*: ______ **[1+3+1 = 5 P.]**

Der Kommutator von Orts- und Impuls-Operator ist $[p, x] = -\mathrm{i}\hbar$ oder $[x, p] = \mathrm{i}\hbar$. [1 P.]

Der Hamilton-Operator für einen ein-dimensionalen harmonischen Oszillator lautet

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \,.$$

Mit dem Ansatz

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\chi_0} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \chi_0 p \right) \quad \text{mit} \quad \chi_0 \in \mathbb{R} \tag{$*$}$$

ergibt sich für $a^\dagger a$ folglich

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \frac{1}{2} \left(\frac{x}{\chi_0} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \chi_0 p \right) \left(\frac{x}{\chi_0} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \chi_0 p \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{\chi_0^2} + \frac{1}{\hbar^2} \chi_0^2 p^2 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar} (xp - px) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{\chi_0^2} + \frac{1}{\hbar^2} \chi_0^2 p^2 - 1 \right) . \end{aligned}$$

Setzt man $\chi_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, so finden wir für $\hbar\omega a^\dagger a$ das Resultat

$$\hbar\omega a^\dagger a = \frac{1}{2} \hbar\omega \left(\frac{m\omega}{\hbar} x^2 + \frac{1}{\hbar m\omega} p^2 - 1 \right) .$$

Ausmultiplizieren ergibt $\hbar\omega a^\dagger a = H - \frac{1}{2}\hbar\omega$. [3 P.]

Den Kommutator $[a^\dagger, a]$ erhalten wir, wenn wir unsere Rechnung für $a^\dagger a$ mit einer analogen für $aa^\dagger$ vergleichen. Offenbar ist

$$\begin{aligned} aa^\dagger &= \frac{1}{2} \left(\frac{x}{\chi_0} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \chi_0 p \right) \left(\frac{x}{\chi_0} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \chi_0 p \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{\chi_0^2} + \frac{1}{\hbar^2} \chi_0^2 p^2 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} (xp - px) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{x^2}{\chi_0^2} + \frac{1}{\hbar^2} \chi_0^2 p^2 + 1 \right) . \end{aligned}$$

Damit finden wir sofort, dass $[a^\dagger, a] = a^\dagger a - aa^\dagger = -1$ ist, alle anderen Terme heben sich weg. Also ist $[a, a^\dagger] = 1$. [1 P.]

4. *Harmonischer Oszillator – Lösung*: ______ **[1+3+2 = 6 P.]**

Die Wellenfunktion zu einem Zustand $|\Psi\rangle$ ist einfach durch das Skalarprodukt mit den Eigenzuständen des Orts-Operators gegeben, $\Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$. [1 P.]

Der Grundzustand des harmonischen Oszillators erfüllt die Gleichung $a|\Psi_0\rangle = 0$. Mit ($*$) in der Ortsdarstellung und $p = -\mathrm{i}\hbar\partial_x$ ist das

$$\langle x|a|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\chi_0} + \chi_0 \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_0(x) = 0 \,.$$

Das führt zu der einfachen gewöhnlichen Differentialgleichung $(\partial_x + \chi_0^2 x)\Psi_0(x) = 0$ mit der Lösung $\Psi_0(x) = \mathit{const}\, \exp(-\frac{1}{2}\chi_0^2 x^2)$. Die Konstante wird durch die Normierungsbedingung $\langle\Psi_0|\Psi_0\rangle = 1$ festgelegt. [3 P.]

Die Energie-Eigenwerte der Zustände

$$|\Psi_n\rangle = \frac{1}{n!} (a^\dagger)^n |\Psi_0\rangle \,,$$

ergeben sich durch Anwenden von $H = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$. Wir wissen, dass $a|\Psi_0\rangle = 0$ ist, also kommutieren wir a durch $|\Psi_n\rangle$ durch. Mit $[a, a^\dagger] = 1$ folgt $[a, a^\dagger a^\dagger] = [a, a^\dagger]a^\dagger + a^\dagger[a, a^\dagger] = 2a^\dagger$ und so weiter bis $[a, (a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1}$. Der Kommutator $[a, \cdot]$ verhält sich wie ein Ableitung, genügt also insbesondere der Leibnitz-Regel für Produkte. Damit ergibt sich

$$H|\Psi_n\rangle = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})|\Psi_n\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|\Psi_n\rangle \,.$$

Die Energie-Eigenwerte sind also $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$. [2 P.]

5. *Drehimpuls und Spin*: **[2+1+3+3 = 9 P.]**
Die Drehimpuls-Algebra lautet bekanntlich

$$[L_j, L_k] = \sum_{l=1}^{3} \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{jk}{}^{l} L_l \,.$$

Ausgeschrieben haben wir $[L_1, L_2] = L_3$, $[L_2, L_3] = L_1$ und $[L_3, L_1] = L_2$. Mit den neuen Operatoren $L_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(L_1 \pm \mathrm{i}L_2)$ lautet die Algebra

$$\begin{aligned}
[L_3, L_\pm] &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left([L_3, L_1] \pm \mathrm{i}[L_3, L_2]\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left((\mathrm{i}\hbar L_2) \pm \mathrm{i}(-\mathrm{i}\hbar L_1)\right) \\
&= \pm\hbar\frac{1}{\sqrt{2}}(L_1 \pm \mathrm{i}L_2) \\
&= \pm\hbar L_\pm
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
[L_+, L_-] &= \frac{1}{2}[L_1 + \mathrm{i}L_2, L_1 - \mathrm{i}L_2] \\
&= \frac{1}{2}\left(-\mathrm{i}[L_1, L_2] + \mathrm{i}[L_2, L_1]\right) \\
&= -\mathrm{i}[L_1, L_2] \\
&= -\mathrm{i}(\mathrm{i}\hbar L_3) \\
&= \hbar L_3 \,.
\end{aligned}$$

Man nennt die $L_\pm$ auch Auf- und Ab-steigeoperatoren. [2 P.]
Wir haben $\vec{L}^2 = \sum_j L_j^2 = L_+L_- + L_-L_+ + L_3^2$, wie aus der Rechnung

$$\begin{aligned}
L_+L_- + L_-L_+ &= \frac{1}{2}\left((L_1 + \mathrm{i}L_2)(L_1 - \mathrm{i}L_2) + (L_1 - \mathrm{i}L_2)(L_1 + \mathrm{i}L_2)\right) \\
&= L_1^2 + L_2^2 + \frac{1}{2}\mathrm{i}\left(L_2L_1 - L_1L_2 + L_1L_2 - L_2L_1\right) \\
&= L_1^2 + L_2^2
\end{aligned}$$

folgt. [1 P.]
Es sei $|\ell, m\rangle$ ein Eigenzustand mit den Eigenwerten

$$\begin{aligned}
L_3|\ell, m\rangle &= \hbar m|\ell, m\rangle \,, \\
\vec{L}^2|\ell, m\rangle &= \hbar^2\ell(\ell + 1)|\ell, m\rangle \,.
\end{aligned}$$

Die Zustände $|\ell', m'\rangle = (L_\pm|\ell, m\rangle)$ verhalten sich unter der Aktion von L_3 wie folgt:

$$\begin{aligned} L_3 L_\pm|\ell, m\rangle &= [L_3, L_\pm]|\ell, m\rangle + L_\pm L_3|\ell, m\rangle \\ &= \pm\hbar L_\pm|\ell, m\rangle + L_\pm \hbar m|\ell, m\rangle \\ &= \hbar(m \pm 1)L_\pm|\ell, m\rangle\,. \end{aligned}$$

Also hat $L_\pm|\ell, m\rangle$ den L_3-Eigenwert $\hbar(m+1)$. Da $\vec{L}^2$ mit allen Komponenten L_j kommutiert, also $[\vec{L}^2, L_j] = 0$, gilt natürlich auch $[\vec{L}^2, L_\pm] = 0$. Also hat $L_\pm|\ell, m\rangle$ denunveränderten $\vec{L}^2$-Eigenwert $\hbar^2\ell(\ell + t)$. Das sieht man auch bei direkter Rechnung:

$$\begin{aligned} (L_+L_- + L_-L_+L_3^2)L_\pm|\ell, m\rangle &= (L_\pm L_\mp + L_\mp L_\pm + L_3^2)L_\pm|\ell, m\rangle \\ &= (L_\pm L_\mp L_\pm + L_\mp L_\pm L_\pm + L_3^2 L_\pm)|\ell, m\rangle \\ &= (2L_\pm L_\mp L_\pm + [L_\mp, L_\pm]L_\pm + L_3[L_3, L_\pm] + [L_3, L_\pm]L_3 + L_\pm L_3^2)|\ell, m\rangle \\ &= (2L_\pm L_\mp L_\pm \mp L_3 L_\pm \pm L_3 L_\pm \pm L_\pm L_3 + L_\pm L_3^2)|\ell, m\rangle \\ &= L_\pm(2L_\mp L_\pm \pm L_3 + L_3^2)|\ell, m\rangle \\ &= L_\pm(L_\mp L_\pm + L_\pm L_\mp + L_3^2)|\ell, m\rangle\,, \end{aligned}$$

was natürlich umständlicher ist. [3 P.]
Mit $J_k = L_k + S_k$ haben wir $[J_j, J_k] = [L_j + S_j, L_k + S_k] = [L_j, L_k] + [S_j, S_k]$, da alle anderen Terme verschwinden. Also ist $[J_j, J_k] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{jk}{}^l(L_l + S_l) = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{jk}{}^l J_l$. Damit ist $\vec{J}^2 = (\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{L}^2 + 2\vec{L}\cdot\vec{S} + \vec{S}^2$. Auflösen nach $2\vec{L}\cdot\vec{S}$ ergibt $\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$ ausgedrückt allein in Quadraten. Bemerkung: Die Operatoren L_j und S_k kommutieren, da sie zu unabhänig messbaren Quanteneigenschaften gehören. Deshalb braucht beim Ausmultiplizieren von $\vec{J}^2$ auch nicht auf die Reihenfolge von $\vec{L}$ und $\vec{S}$ geachtet zu werden. [3 P.]

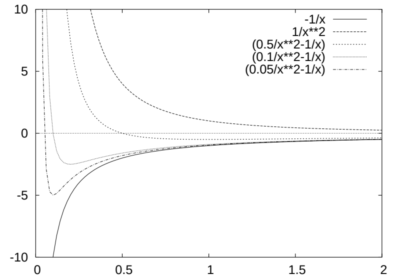
6. *Wasserstoffatom:* **[1+3+3+2 = 9 P.]**
Der Hamilton-Operator für das Wasserstoffatom lautet

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla})^2 - \frac{e^2}{r}\,, \quad r = |\vec{r}|\,,$$

wobei $\vec{r}$ die Koordinate der Relativbewegung und m die reduzierte Masse sind. Allerdings ist in sehr guter Näherung $m = m_e$ die Masse des Elektrons, und r der Abstand zwischen Elektron und Proton. Die Einheiten für die Ladung und die Coulomb-Wechselwirkung sind für diese Klausur unerheblich. [1 P.]
Der Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms besteht aus zwei Termen, der kinetischen Energie $\vec{p}^2/(2m)$ und dem Potential $V(r) = -e^2/r$. Die kinetische Energie hängt nur vom Betrag des Impulses ab, ebenso ist das Potential ein Zentralkraftpotential, das nur vom Betrag des Abstandes abhängt. Es gibt keine direkte Abhängigkeit von der Richtung $\vec{e}_r = \vec{r}/r$ bzw. der Impulsrichtung $\vec{e}_p = \vec{p}/p$. Der Hamilton-Operator ist also invariant unter Drehungen des $\mathbb{R}^3$. Diese werden durch die Drehimpulsoperatoren erzeugt. Die Invarianz von H unter Drehungen schlägt sich darin nieder, dass H mit sämtlichen Drehimpulsoperatoren kommutiert. Also ist $[H, L_j] = 0$ und da $\vec{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$ ist, ist auch $[H, \vec{L}^2] = 0$. Das effektive Potential ist im wesentlichen gegeben durch

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2\ell(\ell + 1)}{r^2} - \frac{e^2}{r}\,.$$

Eine Skizze des effektiven Potentials im Vergleich zum Coulomb-Potentials und des Drehimpulsterms sieht so aus:



Es hat ein lokales Minimum für $\ell \geq 1$. [3 P.]

Das Energiespektrum des Wasserstoffatoms ist gegeben durch die einfache Formel

$$E_N \equiv E_{n,\ell,m} = \frac{\text{Ry}}{(n+\ell+1)^2}\,.$$

Es hängt ausschließlich von der Hauptquantenzahl $N = n + \ell + 1$ ab. Die Konstante ist für die Klausur unerheblich, hat aber ungefähr den Wert $1\,\text{Ry} = -13.6\,\text{eV}$. Die einzelnen Quantenzahlen sind die radiale Quantenzahl n, die die Anzahl der Knoten (Nullstellen) der radialen Komponente der Wellenfunktion abgibt. Die Drehimpuls-Quantenzahl ℓ gibt den Eigenwert $\hbar^2\ell(\ell+1)$ der Wellenfunktion unter $\vec{L}^2$ an und wird als Bahndrehimpuls interpretiert. Die sogenannte magnetische Quantenzahl m gibt den Eigenwert $\hbar m$ unter L_3 an, und wird als Ausrichtung der Drehachse in Bezug auf die (wie auch immer gewählte) z-Achse gedeutet. Bei gegebenem Bahndrehimpuls ℓ kann die magnetische Quantenzahl die $2\ell+1$ verschiednen Werte $m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell-1, \ell$ annehmen. Die gesamte Wellenfunktion $\langle\vec{x}|n,\ell,m\rangle = \Psi_{n,\ell,m}(r,\theta,\varphi) = R_{n,\ell}(r)Y_\ell{}^m(\theta,\varphi)$ läßt sich aufgrund der Drehimpulserhaltung in einen radialen und einen winkelabhängigen Teil zerlegen. Das entspricht klassisch dem Verwenden von Kugelkoordinaten für radialsymmetrische Probleme. [3 P.]

Die Entartung ist insgesamt $N^2 = (n+\ell+1)^2$ und kommt wie folgt zustande: Zunächst kann ein und dieselbe Zahl N auf insgesamt N Weisen durch die Summe zweier Zahlen geschrieben werden, $N = k+1 = (0+k+1) = (1+(k+1)+1) = \ldots = ((k-1)+1+1) = (k+0+1)$. Es sei nun $N = n+\ell+1$ mit gegebenem ℓ. Dieser Bahndrehimpuls hat nun $2\ell+1$ mögliche Werte für die magnetische Quantenzahl. Nun kann ℓ die Werte $0, 1, \ldots, N-1$ annehmen, so dass die gesamte mögliche Entartung durch

$$\sum_{\ell=0}^{N-1}(2\ell+1) = 2\sum_{\ell=0}^{N-1}\ell + \sum_{\ell=0}^{N-1}1 = 2\frac{N(N-1)}{2} + N = N^2$$

gegeben ist. Wer es ganz genau nimmt, kann noch berücksichtigen, dass das Elektron noch einen Spin trägt, der zwei Werte annehmen kann. Damit wäre die gesamte Entartung dann $2N^2$. [2 P.]

7. *Störungsrechnung*: **[1+3+1 = 5 P.]**

Es bezeichne H einen Hamilton-Operator mit bekannten Eigenzuständen $|n\rangle$ und Energie-Eigenwerten $E_n^{(0)}$. Weiter sei H' eine kleine Störung. In erster Ordnung sind die Korrekturen $E_n^{(1)}$ der Energie-Eigenwerte

$$E_n^{(1)} = \langle n|H'|n\rangle$$

einfach durch die diagonalen Matrixelemente der Störung zwischen den ungestörten Zuständen gegeben. [1 P.]

Ein Wasserstoffatom befindet sich in einem homogenen, konstantem Magentfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$, das in die z-Richtung zeigt. Dies kann als Störung mit $H' = \vec{B} \cdot \vec{L} = BL_3$ aufgefasst werden. In erster Ordnung Störungstheorie ergibt sich

$$\langle n, \ell, m|H'|n, \ell, m\rangle = B\langle n, \ell, m|L_3|n, \ell, m\rangle = B\hbar m\langle n, \ell, m|n, \ell, m\rangle = \hbar Bm\,.$$

Diese Korrektur hängt also allein von der magnetischen Quantenzahl ab. Dies wird auch als Zeemann-Effekt bezeichnet. [3 P.]

Das äußere Magnetfeld hebt also die m-Entartung auf, da die radiale Symmetrie gebrochen wird. Es besteht keine Invarianz mehr unter allen Drehungen, sondern nur noch unter Drehungen, deren Drehachse entlang der durch das äußere Magentfeld definierten z-Achse liegt. Vornehm ausgedrückt heißt das, dass die $SO(3)$-Symmetrie zu einer $SO(2)$-Symmetrie gebrochen wird. Jede Verringerung der Symmetrie hebt Entartung auf, und so spalten die Energie-Niveaus $E_{n,\ell,m}$ für jedes ℓ jeweils in $2\ell + 1$ Linien auf. Man beachte aber, dass die Entartung bezüglich ℓ davon nicht aufgehoben wird, der Betrag des Bahndrehimpulses ist nach wie vor eine erhaltene Größe. [1 P.]

Punqte:[1] $\left[\begin{array}{lcl} \textbf{Gesamt} & = & \textbf{42 P.} \\ \textbf{Bestanden} & \geq & \textbf{23 P.} \end{array}\right]$

[1] "Ein Schelm, wer böses dabei denkt!"