UNIVERSITÄT LEIPZIG INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK

Übungen zur

Quantenmechanik II Lösungen

Leipzig, Sommersemester 2007

### 3. Wellenpakete

Wenn man annimmt, dass f und g schon normiert sind, dann ist

(1) 
$$\psi_{12}(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - (f,g)^2}} \left[ f(x)g(y) - g(x)f(y) \right],$$

normiert und (offensichtlich) antisymmetrisch bezüglich  $x \leftrightarrow y$ . Für reelle f, g findet man zusätzilch

(2) 
$$\int |\psi_{12}(x,y)|^2 \, dy = \frac{1}{2[1-(f,g)^2]} \left[ |f(x)|^2 + |g(x)|^2 - 2f(x)g(x) \, (f,g). \right]$$

Sei jetzt  $f(x) = (2/\pi)^{1/4} \exp[-x^2]$  und g(x) = f(x+d), dann

 $(f,g) = \exp[-d^2/2]$ 

Der Verlauf dieser Funktion wurde am Abb.1. für veschiedene Werte von d gezeigt. Man beachte die Symmetrie dieser Funktion bezüglich  $x \rightarrow d/2 - x$ , und das Minimum bei x = d/2.



Abbildung: W(x) für Fermionen (rot) und Bosonen (blau) bei d = 1/2 und  $d = \sqrt{3}$ .

#### 4. Entartungsdruck

Bekanntlich für ein Kastenpotential  $x \in [0, L]$  findet man die Wellenfunktionen

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x) \qquad \text{mit } k_n = \frac{n\pi}{L}$$

deren Energien gleich

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} n^2$$

sind. Der Zustand niedrigster Energie, für drei Bosonen, erhielt man offensichtlich wenn alle drei Teilchen im Zustand  $\psi_1$  sind, d.h.

$$\Psi_B(x_1, x_2, x_3) = \psi_1(x_1) \otimes \psi_1(x_2) \otimes \psi_1(x_3).$$

Die Energie dieses Zustands ist  $E_B = 3E_1$ . Für Fermionen muss die Wellenfunktion  $\Psi_F(x_1, x_2, x_3)$ antisymmetrisch unter der Vertauschung von Teilchen sein (wir haben damit angenommen, dass die Teilchen sich im gleichen Spin-Zustand befinden). Um den Zustand niedrigster Energie für drei Fermionen zu konstruieren muss man also  $\psi_1$  bis  $\psi_3$  nutzen:

$$\Psi_F(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{\sqrt{6}} \epsilon^{ijk} \psi_i(x_1) \otimes \psi_j(x_2) \otimes \psi_k(x_3),$$

mit  $i, j, k = 1 \dots 3$ . Diesen Zustand enspricht die Energie

$$E_F = E_1(1^2 + 2^2 + 3^2) = 14E_1.$$

Für N Bosonen wurde man  $E_B = NE_1$  und  $E_F = E_1 \cdot N(N+1)(2N+1)/6$  erwarten. Offensichtlich wächst die Energie viel schneller im fermionischen Fall. Weiterhin, fällt die Energie (im beiden Fallen) mit der Abstand L ab, d.h. die Teilchen üben eine abstösende Kraft (die proportional zu  $-1/L^3$  ist) auf die Wände.

#### 5. Addition von Drehimpulsen

Wir fangen an mit dem Zustand  $|22\rangle$  (d.h. der Gesamtdrehimpuls J = 2, die z-Projektion m = 2). Offensichtlich als einzige Möglichkeit für m = 2 gibt es

$$\left|\frac{3}{2}\frac{3}{2}\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle \equiv \left|22\right\rangle$$

Analog gilt

$$\left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \equiv \left|2,-2\right\rangle.$$

Durch die Anwendung von  $J_{-}$  auf  $|22\rangle$  erhalten wir einerseits

$$J_{-}|22\rangle = \sqrt{4}\,|21\rangle$$

und anderseits

$$[j_{-}\otimes\mathbf{1}+\mathbf{1}\otimes j_{-}]|\frac{3}{2}\frac{3}{2}\rangle\otimes|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle=\sqrt{3}|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle\otimes|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle+|\frac{3}{2}\frac{3}{2}\rangle\otimes|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle,$$

so dass

$$21\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{3}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle.$$

Durch die Anwendung von  $J_{-}$  können jetzt  $|20\rangle$  und  $|2, -1\rangle$  bestimmt werden:

$$|20\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$
$$|2, -1\rangle = \frac{1}{2} |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2} |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle.$$

Um  $|11\rangle$  zu bestimmen nehmen wir den allgemeinen Ansatz

$$|11\rangle = a|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + b|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$$

und wenden  $J_+$  auf beiden Seiten an. Dies führt auf

$$0 = (a + b\sqrt{3}) \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle,$$

woraus folgt, dass  $a = -b\sqrt{3}$ . Anderseits, wegen der Normierung muss  $|a|^2 + |b|^2 = 1$  sein, d.h. |b| = 1/2. Die Phase von b kann noch beliebig gewählt werden ohne die Eigenschaften von  $|11\rangle$  zu beeinflussen. Wir wählen b = 1/2, also

$$|11\rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2}|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{2}|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle.$$

Nun durch die Anwendung von  $J_{-}$  kriegen wir zunächst

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

und schließlich

$$|1,-1\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{2}|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle.$$

Auf diese Weise haben wir den Tensorprodukt-Raum  $\mathcal{H}_{3/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2}$  ins eine direkte Summe  $\mathcal{H}_2 \oplus \mathcal{H}_1$ zerlegt. Somit wissen wir welche Tensorprodukt-Zustände gleich Eigenzuständen des (quadrierten) Gesamtdrehimpulses  $J^2$  und des  $J_3$  sind.

# 6. Nichtrelativistisches Fermi-Gas bei T=0

Aus der Bedingung, dass der Anzahl von Zuständen bis  $|\vec{p}| = p_f$  muss gleich N sein finden wir:

$$N = \frac{\gamma p_f^3}{3} = \frac{g p_f^3}{6\pi^2 \hbar^3},$$

also

$$p_f = \hbar \left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{1/3} n^{1/3}.$$

Anderseits, aus

$$U = \int d^3x \int_{|\vec{p}| \leqslant p_f} \frac{d^3p}{h^3} \frac{p^2}{2m}$$

folgt

$$\frac{U}{V} = \gamma \frac{p_f^5}{10m} = \frac{3\hbar^2}{10m} \left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{2/3} n^{5/3}$$

und die Zustandsgleichung folgt jetzt unmittelbar aus  $P = \frac{2}{3} \frac{U}{V}$ .

## 7. Semiklassisches Atom-Model

Aus der Euler-Gleichg, wenn der Druck mit Hilfe der Zustandsgleichung durch n ausdruckt wird, folgt eine gewönliche Differentialgleichung erster Ordnung für n(r). Diese Gleichung ist trivial zu intergieren; es ergibt sich

$$Ze^{2}\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R}\right) = \frac{\hbar^{2}}{2m}\left(\frac{6\pi^{2}}{g}\right)^{\frac{2}{3}} n^{\frac{2}{3}}$$

wobei R > r die Integrationskonstante bezeichnet<sup>1</sup> (die Wolke erstreckt sich von r = 0 bis zu r = R). Man beachte, dass beide Seiten der obiegen Gleichung die Diemension der Energie besitzen.

Die Verteilung muss noch normiert werden:

$$N = \int d^3x \, n(r) = 4\pi A \int_0^R r^2 dr \, \left(\frac{R-r}{rR}\right)^{3/2}.$$

Wegen

$$\int_{0}^{1} x^{2} dx \, \left(\frac{1-x}{x}\right)^{3/2} = \frac{\pi}{16}$$

ist die Normierung möglich obwohl die Verteilung bei n = 0 singulär wird. Aus dieser Bedingung lässt sich R als Funktion von N ausdrücken:

$$R = \left(\frac{4N}{A\pi^2}\right)^{\frac{2}{3}}$$

und schließlich

$$n(r) = A \left[ \left( \frac{A\pi^2}{4N} \right)^{\frac{2}{3}} - \frac{1}{r} \right]^{\frac{3}{2}},$$

wobei

$$A = \left[\frac{2mZe^2}{\hbar^2(6\pi^2/g)^{2/3}}\right]^{\frac{3}{2}}.$$

#### 8. Zweidimensionale und relativistische Fermi-Gasen

Im dreidimensionalen Fall, eine partielle Integration bzg. p für  $\Omega$  führt zu

$$\Omega_3 = -\frac{V\gamma}{3} \int_0^{p_f} p^2 dp \, \frac{1}{1 + e^{(E-\mu)\beta}} \cdot \frac{dE_p}{dp} \cdot p.$$

Nun ein Vergleich mit der Formel für U zeigt sofort, dass

$$\Omega_3 = -\frac{2}{3}U, \qquad \text{wenn } E_p = \frac{p^2}{2m}$$

und

$$\Omega_3 = -\frac{1}{3}U,$$
 wenn  $E_p = pc.$ 

Im zweidimensionalen Fall gilt

$$\Omega_2 = -\frac{S\gamma_2}{2} \int_0^{p_f} p dp \, \frac{1}{1 + e^{(E-\mu)\beta}} \cdot \frac{dE_p}{dp} \cdot p.$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Die Konstante R muss positiv sein, weil sonst die Verteilung im Unendlichen nicht mehr normierbar ist.

wobei

$$\gamma_2 = \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^2},$$

und es ergibt sich

$$\Omega_2 = -U,$$
 wenn  $E_p = \frac{p^2}{2m},$ 

also für nichtrelativistische Fermionen in 2D, und

$$\Omega_2 = -\frac{1}{2}U, \quad \text{wenn } E_p = pc,$$

für ultrarelativistische zweidimensionale Fermionen. Die entsprechende Zustandgleichungen sind in der folgenden Taffel zusammengefasst. Zu beachten ist, dass die T = 0 relativistische Zus-

Typ	$p_f(n)$	P(U)	P(n)
3D NR	$p_f = \hbar \left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{1/3} n^{1/3}$	$P = \frac{2}{3}U$	$\frac{\hbar^2}{5m} \left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{2/3} n^{5/3}$
3D REL	—  —	$P = \frac{U}{3}$	$\frac{\pi^2 c\hbar}{4} \left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{1/3} n^{4/3}$
2D NR	$2\hbar\sqrt{\pi} n^{1/2}$	P = U	$\frac{\pi\hbar^2}{2m}n^2$
2D REL	—  —	$P = \frac{U}{2}$	$\frac{2\sqrt{\pi c\hbar}}{3}n^{3/2}$
<b>T</b> ·	1 1 1 0	$\mathbf{D} \cdot \mathbf{O}$	

TABLE 1. Eigenschaften von Fermi-Gasen bei T = 0

tandsgleichungen gelten nur solange die Schallgeschwindigkeit,  $c_s = \sqrt{\frac{1}{m} \frac{dP}{dn}}$ , kleiner als die Lichtgeschwindigkeit ist.

### 9. Störung eines harmonischen Oszillators

Wir führen zunächst die dimensionslosen Koordinaten:

$$y = \alpha x, \qquad \alpha^2 = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}$$

so dass

$$H_0 = \hbar\omega(a^*a + 1/2)$$

mit  $\omega = \sqrt{k/m}$ . Die Störung lässt sich durch y, oder durch die Vernichtungs-/ErzeugungsOperatoren ausdrücken:

$$H' = \frac{by^2}{2\alpha^2} = \frac{b}{4\alpha^2} \, (a + a^*)^2$$

Aus der Störungstheorie ergibt sich

$$b\psi_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\langle n|H'|0\rangle}{\hbar\omega(0-n)} |n\rangle = -\frac{b\sqrt{2}}{4k\cdot 2} |2\rangle$$

wegen  $\hbar \alpha \omega = k$ . Hier  $|n\rangle$  steht für die *n*-te normierte Energieeigenfunktion des ungestörten Oszillators. Damit ist die Grundzustandswellenfunktion im ersten Ordnung gegeben durch

$$|\tilde{0}\rangle = |0\rangle - \frac{b\sqrt{2}}{8k}|2\rangle.$$

Sie ist auch im diesen Ordnung normiert<sup>2</sup>. Bekanntlich lassen sich die Funktionen  $|n\rangle$  leicht berechnen:

(3) 
$$|0\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \exp\left[-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right]$$

(4) 
$$|1\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}} 2\alpha x \exp\left[-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right]$$

(5) 
$$\sqrt{2}|2\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \left(2\alpha^2 x^2 - 1\right) \exp\left[-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right]$$

(6)

Die Grundzustandswellenfunktion ist auch explizit exakt berechenbar, wenn die Störung als ein Teil des harmonischen Potential betrachtet ist. Die exakte  $\tilde{\alpha}$  erfüllt

$$\tilde{\alpha}^2 = \frac{\sqrt{2m(k+b)}}{\hbar} = \alpha^2 \cdot (1+b/k)^{1/2},$$

und die exakte Grundzustandswellenfuntion ist

$$|\tilde{0}\rangle_{ex} = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} (1+b/k)^{1/8} \exp\left[-\frac{\alpha^2 x^2}{2} (1+b/k)^{1/2}\right].$$

Für kleine b beim festen (und kleinen) x lautet die Taylor-Entwicklung

$$|\tilde{0}\rangle_{ex} = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \exp\left[-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right] \left(1 + \frac{b}{8k} - \frac{b}{4k}\alpha^2 x^2\right).$$

Diese Entwicklung stimmt mit dem störungstheoretischen Ergebniss,  $|\tilde{0}\rangle$ , überein.

# 10. Elektrische Suszeptibilität

Die Wellenfunktionen,

(7) 
$$|k\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{k\pi x}{a}\right), \quad \text{mit } k = 2n+1,$$

(8) 
$$|k\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right), \quad \text{mit } k = 2n,$$

sind Eigenfunktionen des ungestörten Hamiltonoperators zu den Eigenwerten  $E_k = \frac{\pi^2 \hbar^2 k^2}{2ma^2}$ . In einem elektrischen Feld ist die Grundzustandswellenfunktion im ersten Ordnung gegeben durch

$$|\tilde{1}\rangle = |1\rangle + \sum_{k>1} a_k |k\rangle$$

mit  $a_k = 0$  für ungerade k, und

$$a_k = E \cdot \frac{B}{k^2 - 1} \int_{-\pi/2}^{\pi_2} dy \sin(2ny) \, y \, \cos(y) =,$$

für k = 2n und mit

$$B = \frac{4mea^3}{\hbar^2 \pi^4}.$$

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Die Korrektur zur Normierung ist vom zweiten Ordnung in b.

 $(E \cdot B \text{ ist dimensionslos}, \text{ wie es sein soll.})$  Man findet leicht

$$\int_{-\pi/2}^{\pi_2} dy \sin(2ny) \, y \, \cos(y) = -\frac{4(-)^n k}{(1-k^2)^2} \equiv c_n.$$

Die Matrixelemente des Dipolmoment-Operators  $\langle 2m|ex|2n \rangle$  verschwinden aus der Paritätsgrunden, und wir erhalten schließlich:

$$\langle \tilde{1} | ex | \tilde{1} \rangle = \frac{4ea}{\pi^2} E B \sum_{n=1}^{\infty} \frac{c_n^2}{k^2 - 1}.$$

Die elektrische Suszeptibilität ist damit positiv; nur n = 1 trägt wesentlich zu der Suszeptibilität:



Abbildung: Grundzustandswellenfunktionen  $|\hat{1}\rangle$  für verschiedene elektrische Felder.

#### 11. Weiße Zwergen

Mit der allgemeinen Zustandsgleichung

$$P = K n^{\gamma},$$

durch Einsetzen von (1) ins (2) erhielt man

$$\frac{1}{r^2} \left( r^2 f' \right)' = -\frac{4\pi G m^2}{K(N+1)} f^N \equiv -A f^N,$$

wobei  $\gamma = \frac{N+1}{N}$ . Diese im Allgemeinen nichtlineare Differentialgleichung zweiter Ordnung die als Lane-Emden-Gleichung bekannt ist hat interresante Eigenschaften. Zunächst führt die Substitution

$$f(r) = \beta g(r/R)$$

auf

$$\frac{1}{x^2}\frac{d}{dx}\left(x^2\frac{dg}{dx}\right) = -g^N(x)$$
$$\beta = (AR^2)^{-\frac{1}{N-1}}.$$

wenn

wobei R beliebig und x = r/R dimensionslos ist. Wir suchen für die Lösungen die analytisch bei x = 0 sind<sup>3</sup>. Solche Lösungen existieren nur wenn g'(x) = 0 bei x = 0.

Sobald eine Lösung, z.B. g(0) = 1, bekannt ist können durch ein geeignetes Wahl von R (und  $\beta$ ) alle Lösungen mit g(0) = const konstruiert werden.

Die Lösungen haben allgemein noch die Eigenschaft, dass sie monoton fallend sind (was aus der Positivität von g und aus  $g' = -\frac{1}{x^2} \int_0^x ds \, s^2 g^N(s)$  unmittelbar folgt), und dass sie (für nichtrelativistische  $N = \frac{3}{2}$  und relativistische N = 3 Fermionen) bei einem endlichen x eine Nullstelle haben (d.h. die Sterne sind kompakt).

Wir nehmen an, dass die Lösung unserer Differentialgleichung mit g(1) = 0 gegeben ist (z.B. numerisch). Die (Elektronen-) Teilchendichte n(x) kann durch g(x) ausgedrückt werden

$$n(r) = (AR^2)^{-\frac{N}{N-1}}g^N(r/R).$$

Sie erstreckt sich von r = 0 bis zu r = R. Die Masse des Sterns hängt von R ab. Wir finden

$$M = 4\pi \int_0^R r^2 dr \, n(r) = 4\pi R^3 (AR^2)^{-\frac{N}{N-1}} \int_0^1 x^2 dx \, g^N(x).$$

Das Integral auf der rechten Seite ist dimensionslos und liefert nur einen Faktor. Für nichtrelativistische Fermionen ist  $N = \frac{3}{2}$  und somit  $M \sim 1/R^3$  (je kleiner der Stern desto massiver (wegen grösserer Dichte)). Erstaunlicherweise genau für relativistische Fermionen (also für Elektronen in einem massiven Stern), N = 3 ist M von R unabhängig, was bedeutet, dass die Gleichgewicht nur für eine Masse möglich ist (für grossere Massen kollabiert der Stern und für kleinere Massen dehnt er sich ohne Ende).

# 12. + 13. Störung eines zwei-niveau Systems

Die allgemeine Formel der Störungstheorie für einen nicht-entarteten Zustand  $\psi_i^0$  sind:

(9) 
$$\psi_i^n = S\left[H'\psi_i^{n-1} - \sum_{k=1}^{n-1} E_i^k \psi_i^{n-k}\right]$$

(10) 
$$E_i^n = \left(\psi_i^0, H' \,\psi_i^{n-1}\right),$$

wobe<br/>i $\psi_i^k$ steht für die Korrektur k-ter Ordnung zu<br/>  $\psi_i^0,\;E_i^k$  für die Korrektur k-ter Ordnung zur Energi<br/>e $E_i^0$ und

$$S = \frac{P_{\perp}}{E_i^0 - H_0} = \sum_{j \neq i} \frac{|\psi_j^0\rangle \langle \psi_j^0|}{E_i^0 - E_j^0}$$

wobe<br/>i $P_{\perp}$ ist der Projektor auf dem zu $\psi^0_i$ orthogonalen Raum. Speziell, im unseren Fall gibt <br/>es zwei Zustände:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix}$$
 zur Energie  $E_0^0 = -1$ 

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Für nichtanalytische (z.B. singuläre) Lösungen muss man bei r = 0 besonders aufpassen. Auf Grund der Nichtlinearität darf g(x) nicht sogar als Distribution genommen werden.

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}$$
 zur Energie  $E_1^0 = 1$ 

Die Strategie zur Berechnung der Korrekturen ist:  $\psi^0 \to E^1 \to \psi^1 \to E^2 \to \psi^2 \to E^3 \to \dots$  Wir haben  $H' = \lambda \sigma_1$ , und nehmen  $\psi^0 = \psi_0^0$ . Damit finden wir

$$S = -\frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|$$

und

(11) 
$$E^1 = (\psi^0, H'\psi^0) = 0,$$

(12) 
$$\psi^{1} = S[\lambda\sigma_{1}|0\rangle - E^{1}\psi^{0}] = -\frac{\lambda}{2}|1\rangle,$$

(13) 
$$E^2 = (\psi^0, H'\psi^1) = -\frac{\lambda^2}{2},$$

(14) 
$$\psi^{2} = S \left[ \lambda \sigma_{1}(-\lambda/2) |1\rangle - E^{2} \psi^{0} - E^{1} \psi^{1} \right] = 0,$$

(15)  $E^3 = 0,$ 

(16) 
$$\psi^{3} = S \left[ \lambda \sigma_{1} \psi^{2} - E^{3} \psi^{0} - E^{2} \psi^{1} - E^{1} \psi^{2} \right] = -SE^{2} \psi^{1} = \frac{\lambda^{3}}{8} |1\rangle,$$

(17) 
$$E^4 = \frac{\lambda^4}{8}.$$

Kurz:

$$\psi = |0\rangle + \left(-\frac{\lambda}{2} + \frac{\lambda^3}{8}\right)|1\rangle,$$
$$E = -1 - \frac{\lambda^2}{2} + \frac{\lambda^4}{8}.$$

Die Wellenfunktion  $\psi$  ist noch nicht normiert.

Das Problem lässt sich offensichtlich auch exakt lösen, wir finden

$$E_{ex} = -\sqrt{1 + \lambda^2},$$
  
$$\psi_{ex} = |0\rangle + \frac{1 + E}{\lambda} |1\rangle.$$

Man sieht leicht, dass die Störungstheoretische Ergebnisse einfach Taylor-Entwicklungen der exakten Lösungen sind. Um die normerte Wellenfunktion  $\tilde{\psi} = Z^{1/2}(\lambda)\psi$  zu bestimmen berechnen wir induktiv die Normierungs-Funktion  $Z(\lambda)$ . Aus

$$Z(\lambda)\left(\psi,\psi\right) = 1$$

und  $Z = \sum_{k=0}^{\infty} z_n \lambda^n$ , mit  $z_0 = 1$  folgt die Relation

$$z_N + \sum_{k=0}^{N-1} z_k \sum_{n,m}^{n+m=N-k} (\psi^m, \psi^n) = 0.$$

Wir finden  $z_1 = 0$ ,

$$z_2 + z_0(\psi^1, \psi^1) = 0.$$

also  $z_2 = -\frac{1}{4}$ . Weiterhin  $z_3 = 0$  und

$$z_4 + z_0[(\psi^3, \psi^1) + (\psi^1, \psi^3)] + z_2[(\psi^1, \psi^1)] = 0,$$

also  $z_4 = \frac{3}{16}$ . Damit können wir leicht verifizieren, dass die Hellmann-Feynman Formel erfüllt ist (bis auf  $O(\lambda^4)$ :

$$\langle \tilde{\psi}, \sigma_1 \tilde{\psi} \rangle = -\lambda + \frac{\lambda^3}{2} = \frac{dE}{d\lambda}$$

Für exakte Lösungen gilt

$$Z(\lambda) = \frac{\lambda^2}{\lambda^2 + (1+E)^2}$$

und mit

$$\langle \tilde{\psi}_{ex}, \sigma_1 \tilde{\psi}_{ex} \rangle = \frac{2\lambda(1+E)}{\lambda^2 + (1+E)^2}$$

ist die Hellmann-Feynman Formel auch exakt erfüllt.

# 14. Wechselwirkung von Elektronen in 1D

Zunächst aus der Taylor-Entwicklung von  $-e^2(R+y-x)^{-1}$  erhalten wir

$$-\frac{e^2}{x_2 - x_1} = -\frac{e^2}{R} - e^2 \frac{(x - y)}{R^2} - e^2 \frac{(x - y)^2}{R^3} + O\left(\frac{(|x| + |y|)^3}{R^4}\right)$$

In der nullten Ordnung ist der Grundzustand  $\psi_0$  ein Tensorprodukt der Grundzustände der harmonischen Oszillatoren  $\psi_0 = |0\rangle \otimes |0\rangle$ . Im Gegensatz zum dreidimensionalen Fall verschwindet die Korrektur zur Energie  $W_1$  erster Ordnung (in  $e^2$ ) nicht<sup>4</sup>. Sie ist einfach zu berechnen:

$$W_1 = -\frac{e^2}{R^3} \left( \psi_0, (x-y)^2 \psi_0 \right) = -\frac{e^2}{2R^3} \left( \psi_0, (a-b)(a^*-b^*) \psi_0 \right) = -\frac{e^2}{R^3}$$

Die Kraft  $F = -\partial_R(W_1) = 3e^2 R^{-4}$  ist positiv, d.h. anziehend.

### 15. Störung eines entarteten Zwei-Niveau-Systems

Allgemein erfüllen in der Störungstheorie die Glieder bis zur Ordnung  $\lambda$  die Gleichung

$$(H_0 - E^0)\psi^1 + (V - E^1)\psi^0 = 0,$$

wobe<br/>i $\lambda V = H'$ . Nun ist in unserem Problem  $H_0$ entartet (und zweid<br/>imensional), was zur Folge hat, dass  $H_0 - E^0 \equiv 0$ . Sei allgemei<br/>n $P_0$  der Projektor auf den Unterraum zu<br/>  $E^0$ . Dann folgt

$$P_0(V - E^1)P_0\psi^0 = (P_0VP_0 - E^1)\psi^0,$$

d.h. die Korrektur(en) erster Ordnung sowie die zugehörige Vektoren (nullter Ordnung)  $\psi^0$  sind aus dem Eigenwertproblem von  $P_0VP_0$  zu bestimmen.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>In der klassischen Rechnung von Fritz London es ist wichtig zu erkennen, dass nicht nur der Erwartungswert des führenden Entwicklungsglieds  $\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2/R^3 - 3(\vec{r}_1 \cdot \vec{R})(\vec{r}_2 \cdot \vec{R})/R^5$ , sonder auch die Erwartungswerte der Glieder höheren Ordnung verschwinden.

Wir finden problemlos die beiden Eigenvektoren und ihre Eigenwerte

$$\psi_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\1 \end{pmatrix}, \qquad E_1^1 = \lambda,$$
$$\psi_2^0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\-1 \end{pmatrix}, \qquad E_2^1 = -\lambda.$$

Es ist zu bemerken, dass man schon von Anfang an die beiden Vektoren als Basis-Vektoren des Unterraumes zu  $E^0$  benutzen konnte. Der  $H_0$  würde sich bei einem Basiswechsel nicht ändern und H' würde diagonal,  $H' = \text{diag}(\lambda, -\lambda)$ .

#### 16. Quantensysteme mit Entartung

Allgemein gilt in der Störungstheorie:

(18) 
$$(H_0 - E_1^0)\psi_1^1 + (V - E_1^1)\psi_1^0 = 0,$$

(19) 
$$(H_0 - E_1^0)\psi_1^2 + (V - E_1^1)\psi_1^1 - E_1^2\psi_1^0 = 0,$$

wobei nur die Gleichungen für die Störung des  $\psi^0 = \psi_1^0$  angegeben sind.  $P_0 = |\psi_1^0\rangle\langle\psi_1^0| + |\psi_2^0\rangle\langle\psi_2^0|$ sei der Projektor auf den zweidimensionalen Unterraum zu  $E^0 = E$ ,  $P_1 = |\psi_1^0\rangle\langle\psi_1^0|$  der Projektor auf  $\psi_1^0$ ,  $P_2 = |\psi_2^0\rangle\langle\psi_2^0|$  der Projektor auf  $\psi_2^0$  und  $Q_0 = P_3$  der Projektor auf den (eindimensionalen) Raum zu  $E_0 = 2E$ . Offensichtlich gilt  $P_0P_1 = P_1$ ,  $P_1P_0 = P_1$  und  $P_0Q_0 = 0$ .

Multiplizieren wir die Gleichung (19) von rechts mit  $P_1$ , so erhalten wir

$$P_1(V - E_1^1)\psi_1^1 = E^2\psi_1^0.$$

(wegen  $(H_0 - E_1^0)\psi_1^0 = 0.$ ) Anderseits führt eine Multiplikation von (18) von links mit  $Q_0$  auf

$$Q_0(H_0 - E_1^0)\psi_1^1 = -Q_0 V\psi_1^0.$$

Auf dem von  $Q_0$  ausgeschnittenen (Unter-)Hilbertraum,  $Q_0\mathcal{H}$  kann nun  $H_0 - E_1^0$  invertiert werden (weil die Eigenwerte von  $H_0$  auf  $Q_0\mathcal{H}$  per Annahme von  $E_1^0$  verschieden sind). Dies führt auf

$$\psi_1^1 = \frac{Q_0 \psi_1^0}{E_1^0 - H_0} \equiv |\psi_3^0\rangle \frac{\langle \psi_3^0 | V | \psi_1^0 \rangle}{E_1^0 - E_3^0},$$

was aus der Störungstheorie von nicht entarteten Niveaus bekannt ist. Wir wissen noch nicht was der Anteil von  $\psi_1^1$  im  $P_0\mathcal{H}$  ist. Wie immer normieren wir den Zustand so, dass  $(\psi_1^0, \psi_1^n) = 0$ , d.h. wir mussen noch  $(\psi_2^0, \psi_1^1)$  bestimmen, d.h.

$$\psi_1^1 = \alpha |\psi_3^0\rangle + \beta \psi_2^0,$$

mit  $\alpha = \frac{\langle \psi_3^0 | V | \psi_1^0 \rangle}{E_1^0 - E_3^0}$  und mit einem unbestimmten  $\beta$ . Wir wenden jetzt  $P_2$  auf die Gleichung (19) und finden

$$P_2(V - E_1^1)\psi_1^1 = |\psi_2^0\rangle \left[ (E_2^1 - E_1^1)\beta + \langle \psi_2^0 | V | \psi_3^0 \rangle \alpha \right] = 0$$

Somit erhalten wir schließlich

$$\psi_1^1 = |\psi_3^0\rangle \frac{\langle \psi_3^0 | V | \psi_1^0 \rangle}{E_1^0 - E_3^0} - |\psi_2^0\rangle \frac{\langle \psi_2^0 | V | \psi_3^0 \rangle \langle \psi_3^0 | V | \psi_1^0 \rangle}{(E_2^1 - E_1^1)(E_1^0 - E_3^0)}$$

und

$$E_1^2 = \langle \psi_1^0 | V \frac{Q_0}{E_1^0 - H_0} V | \psi_1^0 \rangle.$$

Man beachte, dass der letzte Faktor in  $\psi_1^1$  (d.h. der Zahl  $\beta$ ) auch vom ersten Ordnung ist (obwohl es zweimal V enthält), weil  $E_2^1 - E_2^1$  auch vom ersten Ordnung (d.h. klein) ist. Wegen  $\langle \psi_1^0 | V | \psi_2^0 \rangle$  hat dieser Faktor kein Einfluß auf  $E_1^2$ .

Diese Formeln sind offensichtlich allgemein und können bei beliebiger Störung entarteter Niveaus verwendet werden (sobald die Entartung in erster Ordnung aufgehoben wird, d.h.  $E_i^1 \neq E_j^1$  wenn  $i \neq j$ ).

Insbesondere in unserem Fall finden wir

$$\begin{split} \psi_1^0 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\ 1\\ 0 \end{pmatrix}, \qquad E_1^0 = E, \qquad E_1^1 = \lambda, \\ \psi_2^0 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\ -1\\ 0 \end{pmatrix}, \qquad E_2^0 = E, \qquad E_2^1 = -\lambda \\ \psi_3^0 &= \begin{pmatrix} 0\\ 0\\ 1 \end{pmatrix}, \qquad E_3^0 = 2E, \qquad E_3^1 = -\lambda, \end{split}$$

und  $\langle \psi_3^0 | V | \psi_1^0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} = \langle \psi_3^0 | V | \psi_2^0 \rangle$ , also

$$\psi_1^1 = -\frac{\lambda}{E\sqrt{2}} |\psi_3^0\rangle - \frac{\lambda}{4E} |\psi_2^0\rangle,$$
$$E_1^2 = -\frac{\lambda^2}{2E}.$$

#### 17. Teilchen auf einem Kreis im homogänen elektrischen Feld

Die ungestörten Eigenzustände sind

$$|m\rangle = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}},$$

mit  $m \in \mathbb{Z}$  und  $E_m = \beta m^2$ , wobei  $\beta = \frac{1}{2mR^2}$ . Sei  $\alpha = -eR\mathcal{E}/2$ . Die ersten ungestörten angeregte Zustände  $|1\rangle$ ,  $|-1\rangle$  sind offensichtlich energetisch entartet. Überdies gilt:

$$\langle k|V|m\rangle = \alpha(\delta_{k,m-1} + \delta_{k,m+1})$$

und es ist leicht zu sehen, dass

$$P_a V P_a = 0$$

wobei  $P_a$  den Projektor auf den Unterraum  $P_a\mathcal{H}$  der von  $|1\rangle$  und  $|-1\rangle$  aufgespannt wird, bezeichnet. Die Entartung wird also nicht in erster Ordnung aufgehoben, d.h. die Gleichung

$$(V - E^1)\psi = 0$$

kann auf dem Unterraum  $P_a \mathcal{H}$  von einer beliebigen Linearkombination von  $|1\rangle$  und  $|-1\rangle$  erfüllt werden. Nun kann die Gleichung der zweiten Ordnung der Störungstheorie

$$(H_0 - E_1^0)\psi_1^2 + (V - E^1)\psi_1^1 - E_1^2\psi_1^0 = 0,$$

auf  $P_a \mathcal{H}$  projiziert werden. Wir erhalten

$$P_a(V - E^1)\psi_1^1 = E^2\psi_1^0.$$

Anderseits folgt aus der Gleichung der ersten Ordnung wie üblich

$$Q_a \psi_1^1 = -\frac{Q_a V}{E_0 - H_0} \psi_1^0$$

mit  $Q_a = \mathbf{1} - P_a$ , d.h. die Gleichung ersten Ordnung bestimmt die Funktion  $\psi_1^1$  auf  $Q_a \mathcal{H}$ . Insgesamt folgt

$$P_a V \frac{Q_a}{E_0 - H_0} V P_a \psi_i^0 = E^2 \psi_i^0$$

wobei i = -1, 1 da wir die gleiche Rechnung auch für die beiden ungestörten Zustände  $\psi_{\pm_1}^0$  durchführen können (hier spielt der in  $P_a \mathcal{H}$  liegende Anteil von  $\psi_i^0$  keine Rolle, weil  $P_a(V - E^1)P_a\psi$  verschwidtet wegen Entartung von  $E^1$ ). Die obige Gleichung ist ein Eigenwertsproblem auf dem zweidimensionalen Raum  $P_a\mathcal{H}$ . Der Operator auf der linken Seite verschwindet nicht; wir finden

$$P_a V \frac{Q_a}{E_0 - H_0} V P_a = \frac{\alpha^2}{\beta} \left( \begin{array}{cc} \frac{2}{3} & 1\\ 1 & \frac{2}{3} \end{array} \right).$$

Die Eigenwerte dieser Matrix geben die Korrekturen zweiter Ordnung zu der ungestörten Energie  $E^0 = \beta$  an. Sie sind

$$E_{-} = -\frac{\alpha^2}{3\beta}$$

und

$$E_+ = \frac{5\alpha^2}{3\beta}.$$

Diesen Energiekorrekturen entsprechen die Zustände

$$\psi_{-}^{0} = \frac{\sin(\varphi)}{\sqrt{\pi}}$$

 $\psi^0_+ = \frac{\cos(\varphi)}{\sqrt{\pi}}.$ 

und

# 18. Landau Problem; $\vec{A} = (0, B \cdot x, 0)$

Zunächst lohnt es sich dimensionslose Koordinaten einzuführen. Mit  $\omega_c = \frac{eH}{mc}$  (Zyklotronfrequenz) und  $a_0 = \sqrt{\frac{\hbar c}{eH}}$  (magnetische Länge)<sup>5</sup> sind die Koordinaten

$$\tilde{x}^i = x^i/a_0$$

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Für B = 1T $= 3 \cdot 10^4 \frac{ecu}{cm^2}$  ist  $a_0 \approx 1.4 \cdot 10^{-6}$ cm; für Elektronen in GaAs ( $m^* = 0.07m_e$ ) bei B = 1T finden wir  $\omega_c \approx 7 \cdot 10^{14}$ Hz.

dimensionslos (wir schreiben weiter  $x^i$  anstelle von  $\tilde{x}$ ). Nun kann H in Einheiten von  $\hbar\omega_c$  ausgedrückt werden: für  $\vec{A} = (0, B \cdot x, 0)$  finden wir

$$H = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}(-i\partial_y - x)^2,$$

und

$$H = \frac{1}{2} \left[ \left( -i\partial_x + \frac{y}{2} \right)^2 + \left( -i\partial_y - \frac{x}{2} \right)^2 \right],$$

für  $\vec{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0).$ 

In unseren Koordinaten ist der Ansatz:

$$\psi = e^{iky} f(x),$$

was zu

$$Hf = -f''/2 + \frac{1}{2}(x_0 - x)^2 f = Ef$$

führt mit  $x_0 = k$ . Offensichtlich ist also unseres System (in der *x*-Richtung) equivalent zu einem um  $x_0$  verchobenen harmonischen Oszillator. Wir finden

$$E_n = n + 1/2$$

und

$$f_n(x) = \frac{(a^*)^n}{\sqrt{n!}} f_0(x)$$

mit  $a^* = (x - \partial_x)/\sqrt{2}$  wobei

$$f_0(x) = \pi^{-1/4} e^{-(x-x_0)^2/2}.$$

Das Teilchen ist also lokalisiert um  $x = x_0$  und homogen in der y-Richtung. Der elektrische Strom in dieser Richtung

$$j_y = \frac{e}{2} \left[ \overline{\psi}(-i\partial_y - x)\psi - \overline{(-i\partial_y - x)\psi}\psi \right] = e(x_0 - x)|f_n(x)|^2.$$

ist positiv für  $x < x_0$  und negativ für  $x > x_0$ . (In der x-Richtung der Ström verschwindet.)

			4	1	†.								
*	*	1		1		1	ł	1	1	ł	ŧ	7	,
	٨	ŧ	t	1	Ť	ŧ	1	1	1	, i	1	,	,
			ŧ	t	ŧ	i.	*	ł	ł	+	'		
*	*	t	1			1	ŧ	Ī	ļ	ŧ	ŧ	۲	,
	٨	ŧ	t	Ĩ	Ĩ	ł	ĩ.	1	1	ī	1	,	,
		ĩ	ł	1	t	÷	,	ł	ł	+	Ċ		
*		т	÷				ł	Ļ	Ļ	ţ	٠	,	1
	A	ŧ	t	T	I	ł	L	Ì	Ì	Т	÷	,	۲
		¥	ŧ	1	t	Ŧ	'	ł	ŧ	1			
•	•		÷			2	ł	Ļ	Ļ	ł	٠	,	'
		ŧ	Ť			t	ł	Ĩ	ĩ	1	ŧ	,	۲
		¥	t	1	t	ŧ	,	*	*	'			
	-		į.	4			ł	Ļ	ţ	ł	ŧ	,	č.
Ā	4	ŧ	Ť		I	Ť	Ŧ	Ĩ	Ĩ.	Ļ	ŧ	۲	Ţ
		ŧ	t	1	t	t	÷		*				,
-				ŧ	ŧ		+	Ļ	ţ	ŧ	1	'	
	à	ŧ	1			T	ŧ	1	1	Ļ	٠	,	۲
	4	ŧ	t	1	t	ŧ		1		÷	1	,	,
		,	4	ŧ	ŧ	ī.	ŧ	ł	ł	ŧ	3		
4	٨	+				ſ	ŧ	I	ļ	ţ	ŧ	۲	1
X	4	ŧ	t	1	Ť	ŧ	ï	1	1	Ì	1	,	,
							+		+	ŧ			

Abb. 1. Quantenmechanische Ströme im homogenen magnetischen Feld.

**19. Landau Problem für**  $\vec{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0)$ 

Mit einer zusätzlichen Skalierung  $x \to \sqrt{2}x, \, y \to \sqrt{2}y$  ergibt sich

$$H = \frac{1}{4} \left[ \left( -i\partial_x + y \right)^2 + \left( -i\partial_y - x \right)^2 \right].$$

Nun führen wir z = x + iy, und

$$\partial = \frac{1}{2} \left( \partial_x - i \partial_y \right)$$
$$\overline{\partial} = \frac{1}{2} \left( \partial_x + i \partial_y \right)$$

sodass die Operatoren

$$a = -\overline{\partial} - z/2$$
  
 $a^* = \partial - \overline{z}/2$   
 $b = \partial + \overline{z}/2$   
 $b^* = -\overline{\partial} + z/2.$ 

die Vertauschungsrelationen  $[a, a^*] = 1$ ,  $[b, b^*] = 1$ ,  $[a, b] = 0 = [a, b^*]$  erfüllen, d.h. a, b und  $a^*, b^*$  verhalten sich wie unabhängige Vernichtunsg-/Erzeugungs-Operatoren. Außerdem gilt

$$K = -i\partial_{\varphi} = z\partial - \overline{z}\overline{\partial} = (b^*b - a^*a),$$
  
$$H = a^*a + \frac{1}{2}.$$

Zu beachten ist, dass die Energie der Zustände von b unabhängig ist. Die Eigenzustände von H sind natürlich auch Eigenzuständen von  $N = a^*a$ . Sei  $a^*a\psi = c\psi$ ; dann  $a^*a a\psi = (c-1)a\psi$ , d.h. der Zustand  $a\psi$  ist auch ein Eigenzustand von  $a^*a$  jedoch zum Eigenwert c-1. Nun der Operator  $a^*a$ ist offensichtlich positiv, woraus folgt unmittelbar, dass es einen Zustand  $|0\rangle$  geben muss, der durch a vernichtet sein soll,  $a|0\rangle = 0$ . Die Wellenfunktion dieses Zustands erfüllt

$$\partial_{\overline{z}}\psi + z/2\psi = 0.$$

(Wir betrachten z und  $\overline{z}$  als unabhängige Variablen.) Wir finden also

$$\psi = g(z)e^{-|z|^2/2},$$

wobei g(z) für eine beliebige analytische Funktion von z steht. Das ist die Entartung des Zustands  $|0\rangle$ . Wegen [H, b] = 0 folgt, dass die Zustände  $(b^*)^m |k\rangle$  die gleiche Energie wie  $|k\rangle = (a^*)^n |0\rangle$  besitzen. Man sieht sofort, dass die Anwendung von  $b^*$  auf  $|0\rangle$  gleichbedeutend mit einer Multiplikation mit z ist. Sei  $g^{(n)}$  die n-te Ableitung von g(z) am z = 0, dann gilt

$$g(z)e^{-|z|^2/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{g^{(n)}}{n!} (b^*)^n e^{-|z|^2/2},$$

d.h.  $g(z)e^{-|z|^2/2}$  (die entartete Form von  $|0\rangle$ ) kann als eine Überlagerung von Zuständen  $(b^*)^n e^{-|z|^2/2}$  verstanden werden. Wegen

$$-i\partial_{\varphi} = z\partial - \overline{z}\overline{\partial} = (b^*b - a^*a)$$

folgt, dass das Spektrum von  $b^*b$  diskret sein muss (die Wellenfunktionen mussen periodisch bzgl.  $\varphi$  sein). Wie im Fall von  $a^*a$  ist  $b^*b$  ein positiver Operator und b erniedrigt der Wert dieses Operators um 1, also muss es einen von Zustand geben, der von b vernichtet wird. Wir definieren also

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-|z|^2/2}$$

und

$$|mn\rangle = \frac{(a^*)^n (b^*)^m}{\sqrt{n!m!}} |00\rangle, \qquad m \ge 0, \ n \ge 0.$$

Der Zustand  $|00\rangle$  wird von *a* sowie von *b* vernichtet. Die Zustände  $|mn\rangle$  sind Eigenzustände von *K* zum Eigenwert m - n und haben Energien  $E_{mn} = n + 1/2$ .

Die Ströme diskutiert man am besten in dem man die radiale und azimutale Komponenten berechnet; wegen

$$\partial_{\varphi} = -y\partial_x + x\partial_y, \qquad \partial_r = \frac{x}{r}\partial_x + \frac{y}{r}\partial_y$$

und

$$\Pi_x = -i\partial_x + \frac{y}{2}, \qquad \Pi_y = -i\partial_y - \frac{x}{2}$$

findet man

$$j_{\varphi} = \frac{-ie}{2} [\overline{\psi} \partial_{\varphi} \psi - \overline{\partial_{\varphi} \psi} \psi] - e \frac{r^2}{2} |\psi|^2$$

wobe<br/>i $r^2=x^2+y^2.$ Für $\psi=|mn\rangle$  ergibt sich

$$j_{\varphi}^{mn} = e\left[(m-n) - \frac{r^2}{2}\right] |\psi|^2.$$

Die radiale Komponente des Ströms verschwindet. Die Abbildunen 2 zeigt die Ströme für  $|10\rangle$  und  $|70\rangle$ .



Abb. 2. Quantenmechanische Ströme von  $|m0\rangle$  Zustände im homogenen magnetischen Feld (vorsicht: verschiedene Skala).

Man beachte, dass es Regionen gibt, wo die Ströme in der nicht-klassichen (positiven) Richtung fließen. Für die Erwartungswerte des Drehimpulses in der z-Richtung gilt

$$\langle J_z \rangle_{mn} = \langle x \Pi_y - y \Pi_x \rangle_{mn} = \int dx dy \, j_{\varphi}^{mn} / e = m - n - \frac{1}{2} \langle mn | (b^* - a)(b - a^*) | mn \rangle = \frac{m - 3n}{2}$$

Das nicht-klassiche Verhalten tritt also meistens für hohe m's.

Klassische Lösung Aus der Lagrange-Funktion

$$L = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2) + \frac{e}{c}A_iv^i$$

folgen die Bewegungsgleicungen:

$$\frac{d}{dt}[v_x + \omega_c y] = 0,$$
$$\frac{d}{dt}[y_x - \omega_c x] = 0.$$

Die Lösungen hängen von vier Parameter:  $x_0, y_0, t_0, R$ ,

$$x = x_0 + R\cos[\omega_c(t - t_0)]$$
$$x = y_0 - R\sin[\omega_c(t - t_0)]$$

und beschreiben eine zirkulation von Teilchen in der negativen Richtung.

#### 20. Quantenteilchen mit Spin und Drehimpuls

Wir führen die Bezeichnung

$$(J_{-})^{n}|jj\rangle = c_{n}|j,j-n\rangle$$
ein, und finden rekursiv, wegen  $J_{-}|jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}|j,m-1\rangle$ ,
$$c_{n} = \sqrt{\frac{(2j)!n!}{(2j-n)!}}.$$

Es gilt auch

$$c_{n+1} = c_n \sqrt{(n+1)(2j-n)}.$$

**Der Fall** j = l + 1/2. Trivialerweise gilt

$$|jj\rangle = |l\rangle \otimes |+\rangle,$$

wobei  $|l\rangle$  ist ein Eigenzustand von L zum Eigenwert l, und  $|+\rangle$  ist der Eigenzustand von S zum Eigenwert +1/2. Nun wenden wir  $J_{-}$  sukzessiv auf  $|jj\rangle$  und erhalten

$$c_n|j,j-n\rangle = d_n|l-n\rangle \otimes |+\rangle + nd_{n-1}|l-n+1\rangle \otimes |-\rangle,$$

wobei  $d_n$  ist der Analog von  $c_n$  für den Bahndrehimpuls. Einfache Schritte führen letzt endlich auf

$$|j,j-n\rangle = \sqrt{\frac{2l+1-n}{2l+1}}|l-n\rangle \otimes |+\rangle + \sqrt{\frac{n}{2l+1}}|l-n+1\rangle \otimes |-\rangle.$$

Diese Zustände sind normiert wie man leicht zieht.

**Der Fall** j' = l - 1/2. Es muss gelten

$$|j'j'\rangle = \alpha |l-1\rangle \otimes |+\rangle + \beta |l\rangle \otimes |-\rangle,$$

wobei wir Annehmen, dass  $\alpha$  reell und positiv ist.  $J_+$  vernichtet  $|j'j'\rangle$  und es folgt

$$|j'j'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \left[ \frac{d_1}{\sqrt{2l}} |l-1\rangle \otimes |+\rangle - \sqrt{2l} |l\rangle \otimes |-\rangle \right],$$

wobei  $d_1 = \sqrt{2l}$ . Nun man sieht leicht, dass durch die sukkzessive Anwendung von  $J_-$  eine kompakte Formel hergeleitet werden kann:

$$c_n|j',j'-n\rangle = \frac{d_{n+1}}{c_n\sqrt{2l(2l+1)}}|l-n-1\rangle \otimes |+\rangle + \left[\frac{n-2l}{\sqrt{2l(2l+1)}}\right]\frac{d_n}{c_n}|l-n\rangle \otimes |-\rangle,$$

und damit

$$|j',j'-n\rangle = \sqrt{\frac{n+1}{2l+1}}|l-n-1\rangle \otimes |+\rangle - \sqrt{\frac{2l-n}{2l+1}}|l-n\rangle \otimes |-\rangle.$$

**Speziallfall** l = 1. Die Anwendung obiegen Formel führt im Speziallfall l = 1 auf

$$\begin{split} |j, \frac{3}{2}\rangle &= |1\rangle \otimes |+\rangle, \\ |j, \frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |0\rangle \otimes |+\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |1\rangle \otimes |-\rangle, \\ |j, -\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} |-1\rangle \otimes |+\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |0\rangle \otimes |-\rangle, \\ |j, -\frac{3}{2}\rangle &= |-1\rangle \otimes |-\rangle, \end{split}$$

mit j = 1 + 1/2, und

$$|j', \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle \otimes |+\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle \otimes |-\rangle,$$
  
$$|j', -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|-1\rangle \otimes |+\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle \otimes |-\rangle,$$

für j' = 1 - 1/2

# 21. Spin-Bahn Kopplung und Wechselwirkung mit einem Magnetfeld

Wegen  $2L \cdot S = J^2 - L^2 - S^2$  können die Matrixelemente des  $H_{LS}$  sofort abgelesen werden: in dem Unterraum zu  $j = \frac{3}{2}$  ist  $2L \cdot S = 1$ , und in dem zu  $j' = \frac{1}{2} 2L \cdot S = -2$ . Nun die Matrixelemente des  $H_M$  sind leicht zu berechnen aus

$$\begin{split} H_M |j, \frac{3}{2} \rangle &= 2|1\rangle \otimes |+\rangle, \\ H_M |j, \frac{1}{2} \rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|0\rangle \otimes |+\rangle, \\ H_M |j, -\frac{1}{2} \rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}}|0\rangle \otimes |-\rangle, \\ H_M |j, -\frac{3}{2} \rangle &= -2|-1\rangle \otimes |-\rangle, \\ H_M |j', \frac{1}{2} \rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle \otimes |+\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle \otimes |-\rangle, \\ H_M |j', -\frac{1}{2} \rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle \otimes |-\rangle, \end{split}$$

Die Vektoren  $|1\rangle \otimes |+\rangle$  und  $|-1\rangle \otimes |-\rangle$  bereits Eigenvektoren von H sind; um das Problem zu lösen mussen noch die weitere vier Eigenvektoren bestimmt werden. Wir schränken uns also zu dem von diesen Vektoren gespannten Raum (d.h. zu dem Hilbertraum ohne den schon gefundenen Eigenvektoren von H).

In der Tensor-Produkt-Basis ist

$$H_M|0\rangle \otimes |+\rangle = 1|0\rangle \otimes |+\rangle$$
$$H_M|0\rangle \otimes |-\rangle = -|0\rangle \otimes |-\rangle$$
$$H_M|1\rangle \otimes |-\rangle = 0$$
$$H_M|-1\rangle \otimes |+\rangle = 0$$

 $H_M$  ist in dieser Basis diagonal,  $H_M = \text{diag}(\beta, -\beta, 0, 0)$ . Wegen  $LS = L_zS_z + \frac{1}{2}(L_+S_- + L_-S_+)$  kann die 4×4 Matrix von  $H_{LS}$  auch leicht bestimmt werden:

#### 22. Einfache Variationsprobleme

Die normierten Versionen der Versuchsfunktionen sind

$$\psi_a(x) = (a/\pi)^{1/4} e^{-ax^2/2},$$
  
$$\chi_a(x) = (2a^3/\pi)^{1/2} \frac{1}{a^2 + x^2}.$$

Mit deren Hilfe können wir die Erwartungswert der kinetischen Energie,  $T = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2$  sofort berechnen:

$$\langle T \rangle_{\psi_a} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{a}{2},$$
  
 $\langle T \rangle_{\chi_a} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{2a^2}.$ 

Für das harmonischen Potential, und die  $\chi$  Funktion findet man die Gesamtenergie:

$$E = \frac{m\omega^2}{2}a^2 + \frac{1}{2a^2}\frac{\hbar^2}{2m}$$

die ein Minimum bei $a^2=\hbar/\sqrt{2}m\omega$ hat. Am Minimum ist

$$E_{min} = \hbar\omega(1/2\sqrt{2} + 1/4) \approx \hbar\omega \cdot 0.6$$

was natürlich eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie  $E_0 = \hbar \omega \cdot 0.5$  liefert. Für die  $\psi$ Funktion ist die Abschätzung offensichtlich besser, da die Versuchsfunktion gerade die Form der Grundzustandswellenfunktion hat. Wir finden

$$E = \frac{m\omega^2}{4a} + \frac{a}{2}\frac{\hbar^2}{2m}$$
$$a_{min} = m\omega/\hbar$$
$$E_{min} = \frac{1}{2}\hbar\omega = E_0.$$

Nun für das Deltapotential ist keine von den Versuchsfunktionen in der Form des Grundzustandswellenfunktion. Für die  $\psi$  Funktion ergibt sich

$$E = -g(a/\pi)^{1/2} + \frac{a}{2}\frac{\hbar^2}{2m}$$
$$a_{min} = \left(\frac{2mg}{\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{\pi}$$
$$E_{min} = -\frac{mg^2}{\hbar^2}\frac{1}{\pi} > E_0 = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}$$

Im Fall der  $\chi$  Funktion finden wir

$$E = -g\frac{2}{\pi a} + \frac{1}{2a^2}\frac{\hbar^2}{2m}$$
$$a_{min} = \frac{\pi\hbar^2}{4mg}$$
$$E_{min} = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}\frac{8}{\pi^2} > E_0.$$

# 23. Neutron im Gravitationsfeld

Zunächst formen wir das Problem so um, dass nur dimensionslosen Gößen auftreten. Aus

$$E\psi = -\frac{\hbar^2\psi''}{2m} + mgz\psi$$

folgt

$$\mathcal{E}\psi = -\psi'' + x\psi,$$

wenn x = bz, mit  $b^3 = 2m^2g/\hbar^2$ . Es gilt auch

$$\mathcal{E} = E/a, \qquad \text{mit } a = \frac{\hbar^2 b^2}{2m}.$$

Das Problem soll offensichtlich für x > 0 betrachtet werden. Wir wählen die (normierten) Versuchsfunktionen

$$\psi_a = 2a^{3/2}xe^{-ax}.$$

Als Mittelwert der kinetischen Energie erhalten wir

$$\langle -\partial_x^2 \rangle = a^2$$

 $E_{\psi} = \frac{3}{2a} + a^2$ 

und für die Gesamtenergie

d.h.

$$a_{min} = (3/4)^{1/3}$$

und

$$E_{min} = 2.47...$$

Man beachte noch das Folgende: die dimensionslose Gleichung kann als

$$\psi'' = (x - \mathcal{E})\psi$$

betrachtet werden. Nun für  $y = x - \mathcal{E}$  ist das gerade die Airy-Gleichung:

$$\partial_u^2 \psi = y\psi$$

Die Airy-Gleichung besitzt zwei unabhängige Lösungen, Ai(x) und Bi(x); Bi(x) wächst schnell für  $y \to \infty$ , was natürlich diese Lösung auschließt. Nun die Ai(x) hat die erste Nullstelle bei y = -2.3381, d.h.  $\psi(x) = Ai(y + \mathcal{E})$  verschwindet bei x = 0 (erfüllt die Randbedingung) erst wenn  $\mathcal{E} = 2.3381$ . Auf diese Weise haben wir die exakte Grundzustandsenergie ermittelt. Die Variationsmethode bietet offensichtlich eine gute Abschätzung dieser Energie.

# 24. Anregungen mit Licht-pulsen - Störungstheoretisch

Wir wiederholen die wichtigsten Formel der Störungstheorie ( $\hbar = 1$ ):

$$\psi_{I}(t) = e^{iH_{0}t}\psi(t), \qquad V_{I} = e^{iH_{0}t}V(t)e^{-iH_{0}t},$$
$$i\dot{\psi}_{I}(t) = V_{I}(t)\psi_{I}(t), \qquad \psi_{I}(t) = U_{I}(t,t_{0})\psi_{I}(t_{0}),$$
$$U_{I}(t,t_{0}) \approx \mathbf{1} - i\int_{t_{0}}^{t} dsV_{I}(s) + (-i)^{2}\int_{t_{0}}^{t} dsV_{I}(s)\int_{t_{0}}^{s} d\tau V_{I}(\tau) + \dots$$

Im ersten Ordnung ist die Zeitentwicklung des Zustands (im Schrödengerbild) gegeben durch

$$\psi(t) = \left[ e^{-iH_0(t-t_0)} - ie^{-iH_0t} \int_{t_0}^t e^{iH_0s} V(s) e^{-iH_0s} \, ds \, e^{iH_0t_0} \right] \psi(t_0)$$

In unserer Aufgabe ist

$$H_0 = \frac{E\sigma_3}{2}, \qquad V_I = f(t)\sigma_1,$$

mit  $f(t) = \alpha \beta / (1 + \beta^2 t^2)$ . Die Energieeigenzustände erfüllen

$$H_0|0\rangle = -\frac{E}{2}|0\rangle, \qquad H_0|1\rangle = \frac{E}{2}|1\rangle.$$

Für die Übergangswahrscheinlichkeit erhalten wir

$$W_{0\to 1} = |\langle \langle 1|\psi(t)\rangle|^2 = \left[\alpha \int_{t_0}^t ds f(s)\right]^2 = \alpha^2 \left[\arctan(\beta t) - \arctan(\beta t)\right]^2,$$

d.h, im Limit  $t \to \infty, t_0 \to -\infty$  gilt

$$W_{0\to 1} = \pi^2 \alpha^2.$$

# Exakte Lösung

Parametrisieren Wir  $\psi_I(t)$  durch

$$\psi_I(t) = a(t)|0\rangle + b(t)|1\rangle,$$

so ergeben sich die Gleichungen

$$i\dot{a} = f b$$
  
 $i\dot{b} = f a$ 

woraus folgt

$$\frac{d}{f(t)dt}\frac{d}{f(t)dt}a = -a$$

Setzt man f(t)dt = dx, d.h.

$$x = \alpha \arctan(\beta t) + c,$$

so folgt

$$a'' = -a,$$

d.h.  $a(x) = \cos(x - x_0)$ . Nun gehört x zu einem kompakten Intervall: für  $t \to \pm \infty$  gilt  $x \to \pm \frac{\alpha \pi}{2}$ . Die "Anfangsbedingung"  $\psi_I(t)|_{t\to\infty} = |0\rangle$  mit

$$\cos(-\alpha\pi/2 - x_0) = 1$$

gleichbedeutend ist. Das führt auf  $x_0 = -\alpha \pi/2$ , also

$$a(t) = \cos(\alpha \arctan \beta t + \alpha \pi/2)$$

Für  $t \to \infty$  finden wir

$$\begin{aligned} |a(t)|^2 &\to \cos^2(\alpha \pi), \\ |b(t)|^2 &\to \sin^2(\alpha \pi). \end{aligned}$$

Damit ist die exakte übergangswahrscheinlichkeit gleich

$$W_{0\to 1} = \sin^2(\pi\alpha).$$

#### 25. Zeitunabhängige Störungen und Phasen in der Störungstheorie

Die störungstheoretische Übergangswahrscheinlichkeit ist gegeben durch

$$W_{0\to 1}(T) = |\langle 1|U(T,0)|0\rangle|^2 = \left[\alpha \int_0^T ds \,\lambda e^{iEs}\right]^2 = \frac{4\lambda^2}{E^2} \,\sin^2\left(\frac{ET}{2}\right),$$

wobei  $|0\rangle$  und  $|1\rangle$  jeweils den Grund- und den angeregten Zustand bezeichnen. Diese Wahrscheinlichkeit offenbar oszilliert mit der Frequenz  $\frac{E}{2}$ ; für kleine  $E \cdot T$  gilt

$$W_{0\to 1}(T) \approx \lambda^2 T^2.$$

Anderseits lässt sich die Übergangswahrscheinlichkeit auch einfach bestimmen, in dem man

$$W_{0\to1}^{e}(T) = |\langle 1|e^{-iHT}|0\rangle|^{2} = |\langle 1|\cos\omega T - i\sigma_{i}n^{i}\sin\omega T|0\rangle|^{2} = \sin^{2}(\omega T)|\langle 1|\sigma_{i}n^{i}|0\rangle|^{2},$$

ausnutzt (der Hamiltonoperator ist zeit-unabhängig). Hier sind:  $\omega = \sqrt{(E/2)^2 + \lambda^2}$  und  $\vec{n} = (\lambda/\omega, 0, E/2\omega)$  (sodass  $\vec{n}^2 = 1$ ). Wir finden die folgende exakte Form der Übergangswahrscheinlichkeit:

$$W^e_{0\to 1}(T) = \sin^2(\omega T) \cdot \frac{\lambda^2}{\omega^2}.$$

Nun oszilliert  $W^e_{0\to 1}(T)$  in der Zeit mit der Frequenz  $\omega$ , die nur für  $\lambda \to 0$  sich der störungstheoretischen Frequenz nähert. Für kleine  $\omega T$  findet man wieder

$$W^e_{0\to 1}(T) \approx \lambda^2 T^2.$$

Daher stimmen beide Ergebnisse für

$$\left(\frac{E^2}{2} + \lambda^2\right) T^2 \ll 1$$

überein (d.h. für Zeiten T kurz im vergleich zu  $1/\lambda$  und 1/E).

# Höhere Ordnungen der Störungstheorie

Man kann die Übergangsamplitude auch systematisch in höheren Ordnungen berechnen. Die Amplitude im ersten Ordnung ist

$$\langle 1|U^1|0\rangle = -2i\frac{\lambda}{E}\sin(ET/2).$$

Im zweiten Ordnung verschwindet der Beitrag; im dritten findet man

$$\langle 1|U^3|0\rangle = \left(\frac{-i\lambda}{iE}\right)^3 e^{-iET/2} \int_0^{iET} dx \, e^x \int_0^x dy \, e^{-y} \int_0^y dz \, e^z$$

d.h. insgesamt

$$\langle 1|U^1 + U^3|0\rangle = -2i\frac{\lambda}{E}\sin(ET/2) + i\left(\frac{\lambda}{E}\right)^3 \left[4\sin(ET/2) - 2ET\cos(ET/2)\right]$$

Zu beachten ist, dass die Korrekturen dritter Ordnung nicht nur periodisch sondern auch wachsend in der Zeit T sind. Sie stimmen besser mit dem exakten Ergebniss

$$\langle 1|U_{exakt}|0\rangle = -i\sin(\omega T)\frac{\lambda}{\omega},$$

für kleine T, aber divergieren für  $T \to \infty$ ! (Die Situation wird noch schlimmer im fünften Ordnung.) Wir weisen auch darauf hin, dass die Nullstellen der Amplitude dritter Ordnung auch viel besser mit den Nullstellen der exakten Amplitude übereinstimmen.



Abbildung: Exakte und störungstheoretische (aus  $U^1$  und aus  $U^1+U^3$ ) Übergangswahrscheinlichkeiten. Hier sind  $E = 2, \lambda = 1/2$ .

# 26. Absorption der elektromagnetischen Strahlung

Wir lösen das Problem nur in der ersten Ordnung der Störungstheorie. Für die Übergangswahrscheinlichkeit finden wir

$$W_{Pm,S} = \left| \int_0^T e^{i\omega_0 s} (-eE_0) \langle \psi_{Pm} \, z \, \psi_S \rangle \cos \omega s \right|^2 = |d_m|^2 (eE_0)^2 f(T),$$

wobei

$$f(t) = \frac{1}{4} \left| \frac{e^{i(\omega_0 + \omega)T} - 1}{i(\omega_0 + \omega)} + \frac{e^{i(\omega_0 - \omega)T} - 1}{i(\omega_0 - \omega)} \right|^2.$$

Nur wenn  $d_m = \langle \psi_{Pm} z \psi_S \rangle \neq 0$  wird die  $W_{Pm,S}$  nichtverschwindende Werte annehmen. Nun für  $m \neq 0$  verschwindet  $d_m$  (bei der Integration über  $\varphi$ ). Für m = 0 finden wir

$$d_0 = \frac{1}{\sqrt{3}} \int r^3 dr \,\overline{R_1(r)} R_2(r)$$

was im Allgemein ungleich Null ist. Eine Analyse von f(T) zeigt ein Resonanzverhalten bei  $\omega - \omega_0 = 0$  (Fermi Golden Rule). Wir schliessen daraus, dass für linear-polarisierten elektromagnetischen Wellen wird es nur Übergänge zwischen S und P, m = 0 Niveaus geben (die Erwartungswert des Bahndrehimpulses im Endzustand verschwindet). Die Anregungswahrscheinlichkeit wird gross nur für resonante Wellen,  $\omega - \omega_0 = 0$ .

#### 27. Anregungen eines harmonischen Oszillators mit EM-Strahlung

Wenn die zeitabhängige Störung periodisch in der Zeit ist,

$$V = \alpha X \cos(\omega t),$$

mit einer Zahl  $\alpha$  und einem zeitunabhängigen Operator X, dann gilt in der ersten Ordnung der Störungstheorie<sup>6</sup>

$$\lim_{T \to \infty} \frac{|W_{21}(T)|^2}{T} = |\langle 2|\alpha X|1\rangle|^2 \frac{\pi}{2} \delta(\omega - \Delta E),$$

wobei  $\Delta E = E_2 - E_1$ . Für einen harmonischen Oszillator, in der dimensionslosen Koordinaten  $(x \to x/b \text{ mit } b = \sqrt{km}/\hbar)$ , und in der Dipolnäherung haben wir

$$V = -eE_0 z \cos(\omega t)$$

 $\operatorname{mit}$ 

$$z = \frac{a_z^* + a_z}{\sqrt{2}}.$$

Die Energieeigenzustände des Oszillators sind gegeben durch

$$|nkm\rangle = \frac{(a_x^*)^n}{\sqrt{n!}} \frac{(a_y^*)^k}{\sqrt{k!}} \frac{(a_z^*)^m}{\sqrt{m!}} \psi_0.$$

Für die Matrixelemente des X = z ist die xy-Abhängigkeit der Wellenfunktion unwichtig (die Matrix ist diagonal bzgl. n und k). Wir erhalten

$$\langle nkm|z|nkm'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{m}\delta_{m,m'+1} + \sqrt{m'}\delta_{m',m+1}\right)$$

Die Dipolübergänge erfüllen also die Auswahlregeln:  $\Delta m = \pm 1$ ,  $\Delta n = 0$ ,  $\Delta k = 0$ . Für die Übergangsrate  $m - 1 \rightarrow m$  finden wir

$$\lim \frac{|W|}{T} = \frac{e^2 E_0^2 m}{2} \frac{\pi}{2} \delta(\omega - \omega_0)$$

(Der Energieunterschied zwischen den beiden Zustände ist immer  $\Delta E = \hbar \omega_0$ .)

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Das ist die Fermis-Goldene-Regel. Zum Beweis, man beachte, dass  $\lim_{T\to\infty} \sin^2(xT)/x^2T = \pi\delta(x)$ 

# Verbotene Übergänge:

Für die verbotene Übergänge ist die Störung gegeben durch

(20) 
$$V = eE_0k \, zx \, \sin(\omega t).$$

Es müssen also die Matrixelemente von X = zx bestimmt werden. Nun die Energieeigenfunktionen sind Produkten von Funktionen von x, y und z; deshalb

$$\langle nkm|zx|n'km'\rangle = \frac{1}{2} \left(\sqrt{m}\delta_{m,m'+1} + \sqrt{m'}\delta_{m',m+1}\right) \left(\sqrt{n}\delta_{n,n'+1} + \sqrt{n'}\delta_{n',n+1}\right),$$

wieder diagonal bzg. k. Die verbotene Übergänge erfüllen damit:  $\Delta m = \pm 1$ ,  $\Delta n = \pm 1$ ,  $\Delta k = 0$ . Nun die Übergänge  $\Delta m = +1$ ,  $\Delta n = +1$  und  $\Delta m = -1$ ,  $\Delta n = -1$  finden zwischen den Zustände mit  $\Delta E = 2\hbar\omega_0$  statt und z.B. für den Übergang

$$|(n-1)k(m-1)\rangle \rightarrow |nkm\rangle$$

finden wir

$$\lim \frac{|W|}{T} = \frac{e^2 E_0^2 m}{2} \left(\frac{k^2 n}{2}\right) \frac{\pi}{2} \delta(\omega - \omega_0)$$

Diese Übergangsrate ist gleich der für den Dipolübergang

$$|nk(m-1)\rangle \rightarrow |nkm\rangle$$

multipliziert mit einem Faktor

$$\frac{k^2 n}{2} = \frac{k^2}{2} |\langle n - 1 | x | n \rangle|^2.$$

Dieser Faktor kann als ein Quadrat eines Produkts des Wellenvektors mit dem maximalen Erwartungswert des x-Operators für Überlagerungen von  $|n\rangle$  und  $|n-1\rangle$  angesehen werden. Er ist klein wenn die Länge der elektromagnetischen Welle klein im Vergleich zu den möglichen Erwartungswerten von x ist. Man erwartet deshalb, dass die verbotene Übergänge werden nur bei hoch angeregten Zustände eine wichtige Rolle spielen.

# **Der Fall** $\Delta E = 0$

Für die Übergänge mit  $\Delta m \cdot \Delta n = -1$ , also  $\Delta E = 0$ , d.h. zwischen den Entarteten Energieeigenzustände des harmonischen Oszillatros, macht der Begriff der Übergangsrate wenig Sinn. Mit der Bezeichnung (nur *n* und *m*)

$$|n-1, m+1\rangle = |-1\rangle$$
$$|n, m\rangle = |0\rangle$$
$$|n+1, m-1\rangle = |-1\rangle$$

wir nehmen an, dass die Zeit-Entwiclung nur diese drei Zustände betrifft (gleichbedeutend mit der ersten Ordnung Rechnung in der Störungstheorie). Der Hamiltonoperator ist dann

$$V = (eE_0k)\sin(\omega t)\left[\epsilon_1(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|) + \epsilon_2(|0\rangle\langle -1| + |-1\rangle\langle 0|)\right],$$

mit

$$\epsilon_1 = \sqrt{(n+1)m}, \qquad \epsilon_2 = \sqrt{n(m+1)}.$$

Die Schrödingergleichung besitzt eine exakte Lösung für

$$\psi(t) = a(t)|0\rangle + b(t)|1\rangle + c(t)|-1\rangle$$

mit  $\psi(0) = |0\rangle$ . Wir finden

$$a(t) = \cos\left\{ \left[\cos(\omega t) - 1\right] \frac{eE_0 k\sqrt{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2}}{\omega} \right\}.$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das System den Anfangszustand nicht verlässt ist damit gleich

$$|a|^{2} = \cos^{2} \left\{ [\cos(\omega t) - 1] e E_{0} \sqrt{(n+1)(m+1) - 1} \right\},\$$

(wegen  $\omega = ck$  für elektromagnetische Wellen). Sie weicht viel von 1 nur für starke Felder  $(E_0)$  und hoch-angeregte Zustände (m und n gross).

# 28. Verbotene Übergänge beim Wasserstoffatom

In dieser Aufgabe sind meistens die Matrixelemente des Störungsoperators zwischen verschiedenen Kugelflächenfunktionen wichtig. Wie man sich leicht überzeugen kann verschwindet das Integral, z.B. auf Grund der Parität,

$$\int_0^\pi \cos^n\theta\,\sin^m\theta\,d\theta,$$

(nur) für ungerade n (und beliebige m). Für die Dipol-Übergägne ist

$$V = -eE_0 r \cos(\theta) \cos(\omega t).$$

Die (Winkel-)Matrixelemente

$$\int_0^\pi \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \overline{Y_{lm}} V Y_{l'm'}$$

verschwinden wenn  $m \neq m'$  oder wenn l + l' + 1 ungerade ist. Damit erhalten wir die Auswahlregeln für Dipol-Übergänge<sup>7</sup>:  $\Delta m = 0$ ,  $\Delta l$  :ungerade.

Für die verbotenen Übergänge

$$V = eE_0k \left(r^2 \sin\theta \cos\varphi \cos\theta\right) \sin(\omega t)$$

analoge Argumente ( $\varphi$ -Integration für  $\Delta m$ , und die Pariät für  $\Delta l$ ) führen zu den Auswahlregeln:  $\Delta m = 1, \Delta l =$ gerade. Die Abbildung zeigt die mögliche Übergänge.

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>Diese Regeln ändern sich natürlich, wenn die Polarisation der elektromagnetischen Welle anderes gewählt wird (z.B. Welle zirkular statt linear polarisiert).



Abbildung: Dipol- und verbotene Übergänge für bestrahlung mit der linear in der z-Richtung polarisierten Welle aus der x-Richtung.

Die relative Übergangsraten (3D-2P (Dipol) gegen 3D-2S (verb.)) lassen sich folgendermassen abschätzen: die Winkel-Integration liefert in beiden Fälle eine Zahl von der Grossenordnung 1; die radiale Funktionen sind immer Funktionen von  $r/a_0$ , wobei  $a_0$  den Bohrschen Radius bezeichnet. Damit Matrixelemente von r von der Grossenordnung  $a_0$ , und die von  $r^2$  von der Grossenordnung  $a_0^2$  sind. Die Übergangswahrscheinlichkeiten erfüllen also

$$\frac{W_{3D-2P}}{W_{3D-2S}} \approx \frac{e^2 E_0^2 a_0^2}{e^2 E_0^2 k^2 a_0^4} = \frac{1}{(ka_0)^2}$$

Die Wellenlängen bei diesen Übergänge sind grösser als 600nm, d.h.  $k \leq 10^7 \frac{1}{m}$ ; mit  $a_0 \approx 5 \cdot 10^{-11} m$  finden wir  $ka_0 = 5 \cdot 10^{-4}$  und damit sind die verbotenen Übergänge um ein Faktor von ~  $10^6$  weniger Wahrscheinlich als die Dipol-Übergänge.

#### 29. Negative Wasserstoff-Ionen

Wir betrachten die Wellenfunktion

$$\Psi(\vec{x}, \vec{y}) = N[\psi_1(\vec{x})\psi_2(\vec{y}) + \psi_2(\vec{x})\psi_1(\vec{y})]$$

zunähst mit N = 1. Zu berechnen ist die Erwartungswert des Hamilton-Operators

$$H = \frac{1}{2}(-\nabla_x^2 - \nabla_y^2) - \frac{\gamma}{|\vec{x}|} - \frac{\gamma}{|\vec{y}|} + \frac{\gamma}{|\vec{x} - \vec{y}|}$$

wobei  $\gamma = 1/137$ . Wir finden<sup>8</sup>

$$\langle -\nabla_x^2 \rangle_{\Psi} = \frac{1}{2} (\alpha^2 + \beta^2) + \frac{8^2 \alpha^4 \beta^4}{(\alpha + \beta)^6}$$

und

$$\langle \frac{1}{x} \rangle_{\Psi} = \frac{\alpha + \beta}{2} + \frac{1}{2} \frac{8^2 \alpha^3 \beta^3}{(\alpha + \beta)^5}.$$

An dieser Stelle bemerken wir, dass für das Wasserstoffatom gilt

$$H = \frac{1}{2}(-\nabla_x^2) - \frac{\gamma}{|\vec{x}|},$$

und mit

$$\psi_1(\vec{x}) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha |\vec{x}|},$$

findet man

$$\langle H \rangle_{\psi} = \alpha^2 / 2 - \gamma \alpha$$

was ein Minimum bei  $\alpha = \gamma$  hat, d.h. die obere Gränze für die Grundzustandsenergie ist

$$E = -\gamma^2/2 = 2.66397 \cdot 10^{-5}.$$

(Das ist eigentlich die Grundzustandsenergie, weil die Versuchsfunktion gerade die Form des Grundzustandswellenfunktion hat.)

Es bleibt noch die Erwartungswert des Operators  $1/|\vec{x}-\vec{y}|$  zu berechnen und die Versuchsfunktion zu normieren. Wir finden

$$\left\langle \frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}|} \right\rangle_{\Psi} = \frac{\alpha\beta(\alpha^4 + 5\alpha^3\beta + 28\alpha^2\beta^2 + 5\beta^3\alpha + \beta^4)}{(\alpha + \beta)^5}$$

für die symmetrisierte Funktion und

$$\left\langle \frac{1}{|\vec{x} - \vec{y}|} \right\rangle_{\chi} = \frac{\alpha\beta(\alpha - \beta)^2(\alpha^2 + 7\alpha\beta + \beta^2)}{(\alpha + \beta)^5},$$

für die antisymmetrisierte Funktion.

Zum Normierung berechnen wir das Skalarprodukt:

$$(\Psi, \Psi) = 1 + \frac{8^2 \alpha^3 \beta^3}{(\alpha + \beta)^6}$$

und

$$(\chi,\chi) = 1 - \frac{8^2 \alpha^3 \beta^3}{(\alpha + \beta)^6},$$

sodass die Normierungskonstante kann a posteriori gleich  $1/\sqrt{(\Psi, \Psi)}$  gewählt werden.

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup>Für die antisymmetrische Funktion,  $\chi(\vec{x}, \vec{y}) = N[\psi_1(\vec{x})\psi_2(\vec{y}) - \psi_2(\vec{x})\psi_1(\vec{y})]$  die letzte Terme bei diesen Erwartungswerten ändern ihre Vorzeichen.

**Optimierung der Versuchsfunktion im symmetrischen Fall** Die Erwartungswert der Energie,

$$\begin{split} \left\{ \frac{1}{2} (\alpha^2 + \beta^2) + \frac{8^2 \alpha^4 \beta^4}{(\alpha + \beta)^6} - \gamma \left[ \frac{\alpha + \beta}{2} + \frac{1}{2} \frac{8^2 \alpha^3 \beta^3}{(\alpha + \beta)^5} \right] + \\ + \gamma \frac{\alpha \beta (\alpha^4 + 5\alpha^3 \beta + 28\alpha^2 \beta^2 + 5\beta^3 \alpha + \beta^4)}{(\alpha + \beta)^5} \right\} / (\Psi, \Psi) \end{split}$$

muss nun bezüglich  $\alpha$  und  $\beta$  minimiert werden. Diese Aufgabe lässt sich numerisch lösen. Wir finden zwei Minima, ein bei

$$\alpha = \gamma \cdot 1.039 = 0.00758394, \qquad \beta = \gamma \cdot 0.283 = 0.00206569$$

und das andere mit  $\alpha \leftrightarrow \beta$ . Die Energie des Grundzustandes ist kleiner als

$$E_{min} = -2.73478 \cdot 10^{-5},$$

also sie ist kleiner als  $E_0 + 0$ , d.h. es ist energetisch ungünstig einen von den beiden Elektronen zu entfernen. Ein solcher  $H^-$  Ion ist also stabil.

# Optimierung der Versuchsfunktion im antisymmetrischen Fall

Für die antisymmetrische Wellenfunktion (d.h. für den symmetrischen Spin-Anteil des Zustandes) ist die Erwartungswert der Energie gleich

$$\left\{\frac{1}{2}(\alpha^2+\beta^2)-\frac{8^2\alpha^4\beta^4}{(\alpha+\beta)^6}-\gamma\left[\frac{\alpha+\beta}{2}-\frac{1}{2}\frac{8^2\alpha^3\beta^3}{(\alpha+\beta)^5}\right]+\gamma\frac{\alpha\beta(\alpha-\beta)^2(\alpha^2+7\alpha\beta+\beta^2)}{(\alpha+\beta)^5}\right\}/(\chi,\chi).$$

Diese Funktion besitzt Minima nur am Rande, d.h. für  $\alpha = 0$  oder  $\beta = 0$ , was gleichbedeutend mit der Bedinung dass einer von den Elektronen gerade in einem Streuzustand mit verschwindenden Impuls und der andere im Grundzustand des Wasserstoffatoms sich befindet. Wir finden also ein Minimum bei

$$\alpha = 0, \qquad \beta = \gamma$$

 $\operatorname{mit}$ 

$$E_{min} = E_0.$$

Elektronen mit symmetrischen Spin-Anteil des Zustandes besitzen also keine stabilen Bindungszustände im Coulomb-Feld eines Protons.



Abbildung: Contourplot der Energie ( $\alpha - \beta$  Ebene) für die symmetrische Wellenfunktion,  $\Psi$ .



Abbildung: Contourplot der Energie (in der  $\alpha - \beta$  Ebene) für die antisymmetrische Wellenfunktion,  $\chi$ . Die Vergrößerung zeigt, dass die Minima wirklich am Rande liegen. (Die Struktur auf der Diagonale ist ein Artefakt.)

30. Freie Wellen in 3D

Die Formel

$$R_{l+1}(x) = -x^l \frac{d}{dx} \left(\frac{R_l}{x^l}\right)$$

lässt sich leicht beweisen durch Narchrechnen. Wir finden rekursiv die folgende Funktionen:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x} \qquad n_0(x) = \frac{\cos x}{x} 
j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x} \qquad n_1(x) = \frac{\cos x}{x^2} + \frac{\sin x}{x} 
j_2(x) = \left(\frac{3}{x^2} - 1\right) \frac{\sin x}{x} - \frac{3\cos x}{x^2} \qquad n_2(x) = \left(\frac{3}{x^2} - 1\right) \frac{\cos x}{x} + \frac{3\sin x}{x^2},$$

und zusätzlich

$$j_3(x) = \left(\frac{15}{x^4} - \frac{6}{x^2}\right)\sin(x) + \left(\frac{1}{x} - \frac{15}{x^3}\right)\cos(x),$$
  
$$n_3(x) = \left(\frac{15}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\sin(x) + \left(\frac{15}{x^4} - \frac{6}{x^2}\right)\cos(x).$$

Die "auslaufende" Lösungen lauten

$$h_0(x) = \frac{\exp(ix)}{ix},$$
  

$$h_1(x) = \left(\frac{1}{ix^2} - \frac{1}{x}\right) \exp(ix),$$
  

$$h_2(x) = \left(\frac{i}{x} - \frac{3}{x^2} - \frac{3i}{x^3}\right) \exp(ix),$$
  

$$h_3(x) = \left(\frac{1}{x} + \frac{6i}{x^2} - \frac{15}{x^3} - \frac{15i}{x^4}\right) \exp(ix).$$

31. Zerlegung einer eneben Welle

$$\begin{split} Y_0^0 &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \\ Y_0^1 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \\ Y_0^2 &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2 \theta - 1), \\ Y_0^3 &= \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5\cos^3 \theta - 3\cos^2 \theta), \end{split}$$

$$\int_{-1}^{1} e^{ixs} ds = 2\frac{\sin x}{x}$$

und

Mit

finden wir

$$(e^{ix\cos\theta}, Y_0^0) = \sqrt{4\pi} \frac{\sin x}{x} = \sqrt{4\pi} j_0(x), (e^{ix\cos\theta}, Y_0^1) = 2\sqrt{3\pi} (-i\partial_x) \frac{\sin x}{x} = 2\sqrt{3\pi} i j_1(x), (e^{ix\cos\theta}, Y_0^2) = \sqrt{5\pi} (-3\partial_x^2 - 1) \frac{\sin x}{x} = -\sqrt{20\pi} j_2(x), (e^{ix\cos\theta}, Y_0^3) = \sqrt{7\pi} (5i\partial_x^3 + 3i\partial_x) \frac{\sin x}{x} = -2i\sqrt{7\pi} j_3(x).$$

(Hier überall  $x = k \cdot r$ .) Damit sind:  $c_0 = \sqrt{4\pi}$ ,  $c_1 = 2i\sqrt{3\pi}$ ,  $c_2 = -\sqrt{20\pi}$ ,  $c_3 = -2i\sqrt{7\pi}$ . Hier treten nur die *j*-Funktionen auf weil die ebene Welle überall regulär ist, und damit kann ihre entwicklung keine singuläre Funktionen enthalten. Die Qualität der Näherung kann auf den folgenden Skizzen abgeschätzt werden (wir vergleichen  $\exp[ikz]$  mit  $\sum_{0}^{4} c_n j_n(kr) Y_0^n(z/r)$ , für k = 0.1)



Abbildung: Die Phasen der exakten und genäherten ebenen Wellen.



Abbildung: Die Betragsquadrate der exakten und genäherten ebenen Wellen in der x und z Richtung.

# 32. Streuung von Elektronen an einer Neumann-Sphere

Per Definition gibt es eine Zerlegung

$$\Psi = \sum_{l=0}^{\infty} \left[ \overline{c_l} j_l(x) Y_0^l(\theta) + a_l h_l(x) Y_0^l(\theta) \right].$$

Nun die Projektion des Gradients von  $\Psi$  auf den Normalvektor der Kugel bei r = 1 enthält natürlich keine Winkelableitungen. Damit muss gelten

$$\partial_x(\Psi)|_{x=k} = 0.$$

Diese Bedingung liefert die  $a_l$  für jedes l eindeutig fest, weil die  $c_l$  für jedes l bekannt sind:

$$a_l = -\overline{c_l} \, \frac{j_l'(k)}{h_l'(k)}.$$

Das ist schon die gesuchte Lösung. Man kann nun die lokale quantenmechanische Wahrscheinlichkeitstrome skizzieren:



Abbildung: Die Phasen der (genäherten, aus der positiven z-Richtung kommenden) ebenen Wellen und der (genäherten) Lösung des Neumann-Problems.



Abbildung: Die Betragsquadrate der (genäherten, aus der positiven z-Richtung kommenden) ebenen Wellen und der (genäherten) Lösung des Neumann-Problems.