Übung 1. *Wasserstoffatom und der Lenz'sche Vektor*

Die $(2l+1)$-fache Entartung des Energiespektrums des Wasserstoffatoms ist eine Konsequenz der Erhaltung des Drehimpulses. Die totale n^2-Entartung im Wasserstoffatom ist die Konsequenz einer weiteren Erhaltungsgrösse, des Lenz'schen Vektors. Hier möchten wir die n^2-Entartung herleiten. Die Übungsaufgabe ist als Ergänzung zum Kapitel 8.3 im Skript gedacht. Sie enthält Berechnungen, die dort nicht explizit durchgeführt, deren Resultate aber verwendet werden.

Der Lenz'sche Vektor ist gegeben durch ($|\vec{x}| = r$)

$$\vec{J} = \frac{1}{2\mu}(\vec{p} \wedge \vec{L} - \vec{L} \wedge \vec{p}) - \kappa \frac{\vec{x}}{r}, \tag{1}$$

wobei μ die reduzierte Masse bezeichnet, und $\vec{p}$, $\vec{r}$ und $\vec{L}$ die Impuls-, Orts- und Drehimpulsoperatoren sind.

(a) Zeige, dass $[H, J_i] = 0, \;\; i = 1, 2, 3.$

Es gilt $\vec{L} \cdot \vec{J} = 0$ und

$$J^2 = \frac{2H}{\mu}(L^2 + \hbar^2) + \kappa^2, \tag{2}$$

das heisst, der Hamiltonian kann als Funktion der Erhaltungsgrössen L^2 und J^2 ausgedrückt werden. Wir führen den Operator

$$\vec{K} = \sqrt{\frac{-\mu}{2H}} \frac{1}{\hbar} \vec{J} \tag{3}$$

ein.

(b) Anstelle von $\vec{L}$ verwenden wir nun wie im Skript $\vec{M} = \vec{L}/\hbar$. Zeige die zweite Relation (8.3.10) im Skript,

$$[M_i, K_j] = i\epsilon_{ijk} K_k \tag{4}$$

sowie

$$H = -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2(K^2 + M^2 + 1)}. \tag{5}$$

Der Beweis der ersten Gleichung (8.3.10) ist sehr aufwendig und wird nicht verlangt, das Resultat

$$[K_i, K_j] = i\epsilon_{ijk} M_k \tag{6}$$

kann ohne Beweis weiter verwendet werden.

Der Operator $\vec{K}$ ist nur für $H < 0$ selbstadjungiert. Da wir uns für die gebundenen Zustände interessieren, ist dies jedoch kein Problem. Wir definieren nun $\vec{S} = (\vec{M} + \vec{K})/2$ und $\vec{D} = (\vec{M} - \vec{K})/2$.

(c) Zeige die Relationen (8.3.13),

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk} S_k, \quad [D_i, D_j] = i\epsilon_{ijk} D_k, \quad [S_i, D_j] = 0. \tag{7}$$

(d) Schreibe den Hamilton Operator als Funktion von $\vec{S}$ und $\vec{D}$.

(e) Konstruiere die Eigenzustände des Hamiltonians unter Verwendung der bisherigen Resultate.

(f) Bestimme den Grad der Entartung der Energieeigenwerte.

Lösung.

(a) Der Hamiltonian des H-Atoms ist

$$H = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{\kappa}{r} \tag{8}$$

und die i-te Komponente des Lenz'schen Vektors kann ausgedrückt werden als

$$J_i = \frac{1}{2\mu}\epsilon_{ikl}(p_k L_l - L_k p_l) - \frac{\kappa}{r}x_i. \tag{9}$$

Mit $[p^2, p_k L_l] = p_k[p^2, L_l] + [p^2, p_k]L_l = 0$ und $[p^2, L_k p_l] = L_k[p^2, p_l] = L_k[p^2, p_l] + [p^2, L_k]p_l = 0$ folgt

$$\begin{aligned}
[H, J_i] &= -\frac{\kappa}{2\mu}\epsilon_{ikl}[1/r, p_k L_l - L_K p_l] - \frac{\kappa}{2\mu}[p^2, x_i/r] && (10)\\
&= -\frac{\kappa}{2\mu}\epsilon_{ikl}([1/r, p_k]L_l - L_k[1/r, p_l]) - \frac{\kappa}{2\mu}(p_k[p_k, x_i/r] + [p_k, x_i/r]p_k) && (11)\\
&= i\hbar\frac{\kappa}{2\mu}\epsilon_{ikl}\left(\frac{x_k}{r^3}L_l - L_k\frac{x_k}{r^3}\right) + i\hbar\frac{\kappa}{2\mu}\left(p_k\frac{\delta_{ik}r^2 - x_i x_k}{r^3} + \frac{\delta_{ik}r^2 - x_i x_k}{r^3}p_k\right) && (12)\\
&= i\hbar\frac{\kappa}{2\mu}\left(\epsilon_{ikl}\epsilon_{lnm}\frac{x_k}{r^3}x_n p_m - \epsilon_{ikl}\epsilon_{knm}r_n p_m\frac{x_l}{r^3} + p_k\frac{1}{r} - p_k\frac{x_i x_k}{r^3} + \frac{1}{r}p_k - \frac{x_i x_k}{r^3}p_k\right) && (13)\\
&= i\hbar\frac{\kappa}{2\mu}\left((\delta_{im}\delta_{kn} - \delta_{in}\delta_{km})\frac{x_k}{r^3}x_n p_m - (\delta_{lm}\delta_{in} - \delta_{ln}\delta_{im})x_n p_m\frac{x_k}{r^3} + \dots\right) && (14)\\
&= 0. && (15)
\end{aligned}$$

Hierbei wurde verwendet, dass $L_l = \epsilon_{lnm}x_n p_m,\ [x_i, p_k] = i\hbar\delta_{ik}$ sowie

$$\begin{aligned}
\left[\frac{1}{r}, p_i\right] &= \left[\frac{1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}}, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\right] = -i\hbar\frac{x_i}{r^3}, && (16)\\
\left[p_k, \frac{x_i}{r}\right] &= \left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_k}, \frac{x_i}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}}\right] = -i\hbar\frac{\delta_{ik}r^2 - x_i x_k}{r^3}. && (17)
\end{aligned}$$

(b) Die drei Operatoren $a_i,\ i \in \{1, 2, 3\}$ sind Komponenten eines Vektors, wenn $[a_i, M_j] = i\epsilon_{ijk}a_k$ gilt. Linearkombinationen von Vektoren sind wiederum Vektoren. Für das Wedge-Produkt zweier Vektoren $\vec{a}$, $\vec{b}$ gilt

$$\begin{aligned}
[(\vec{a} \wedge \vec{b})_i, M_j] &= [\epsilon_{inm}a_n b_m, M_j] && (18)\\
&= \epsilon_{inm}(a_n[b_m, M_j] + [a_n, M_j]b_m) && (19)\\
&= i\epsilon_{inm}(\epsilon_{mjk}a_n b_k + \epsilon_{njl}a_l b_m) && (20)\\
&= i(\delta_{ik}\delta_{nj} - \delta_{ij}\delta_{nk})a_n b_k - i(\delta_{il}\delta_{mj} - \delta_{ij}\delta_{ml})a_l b_m && (21)\\
&= i(a_j b_i - a_i b_j) && (22)\\
&= i\epsilon_{ijk}(\vec{a} \wedge \vec{b})_k. && (23)
\end{aligned}$$

Das Wedge-Produkt zweier Vektoren erfüllt also wieder die gewünschten Kummutatorrelationen (ist aber im Allgemeinen noch kein selbstadjungierter Operator). Da $\vec{x}$, $\vec{p}$, $\vec{L}$, $\vec{x}/r$ alles Vektoren sind, ist $\vec{J}$ ebenfalls ein Vektor und somit auch dessen skalierte Version $\vec{K}$. Aus (2) folgt mit (3)

$$-\frac{2H}{\mu}\hbar^2 K^2 = \frac{2H}{\mu}(M^2 + 1) + \kappa^2, \tag{24}$$

was zum gesuchten Resultat führt.

(c) Setze die Definitionen von $\vec{S}$ und $\vec{D}$ ein und verwende (4),(6) sowie den Kommutator zweier Elemente des Drehimpulses.

(d) Die Definitionen von $\vec{S}$ und $\vec{D}$ liefern

$$(2\vec{S})^2 = (\vec{M}+\vec{K})^2, \tag{25}$$
$$(2\vec{D})^2 = (\vec{M}-\vec{K})^2. \tag{26}$$

Mit $\vec{J}\cdot\vec{L}=0$ folgt $\vec{K}\cdot\vec{M}=0$, und damit $K^2+M^2=2S^2+2D^2$. Einsetzen in (5) ergibt

$$H = -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2(2S^2+2D^2+1)}. \tag{27}$$

(e) Da $\vec{S}$ und $\vec{D}$ "Drehimpulse" im Sinne von (7) sind und die Komponenten von $\vec{S}$ und $\vec{D}$ miteinander kommutieren, ist ein gemeinsames Eigensystem $|j_s, j_d, m_s, m_d\rangle$ von S^2, S_z, D^2 und D_z gegeben durch

$$S^2\,|j_s, j_d, m_s, m_d\rangle = j_s(j_s+1)\,|j_s, j_d, m_s, m_d\rangle\,, \tag{28}$$
$$D^2\,|j_s, j_d, m_s, m_d\rangle = j_d(j_d+1)\,|j_s, j_d, m_s, m_d\rangle\,, \tag{29}$$
$$S_z\,|j_s, j_d, m_s, m_d\rangle = m_s\,|j_s, j_d, m_s, m_d\rangle\,, \tag{30}$$
$$D_z\,|j_s, j_d, m_s, m_d\rangle = m_d\,|j_s, j_d, m_s, m_d\rangle\,. \tag{31}$$

Hierbei gilt $m_s=-j_s,\dots,j_s$ und $m_d=-j_d,\dots,j_d$. Wegen $\vec{K}\cdot\vec{M}=0$ gilt $S^2=D^2$ (siehe Definition von $\vec{S}$, $\vec{D}$ und quadriere). Mit $[H,K_i]=0$ und $[H,M_i]=0$ folgt $[H,S_i]=[H,D_i]=0$. Wie im Falle des Drehimpulses $\vec{L}$ folgt dann auch $[H,S^2]=[H,D^2]=0$. Aufgrund dieser Betrachtungen folgt

$$-\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2(2S^2+2D^2+1)}\,|j_s=j_d, m_s, m_d\rangle = -\frac{\mu\kappa^2}{2\hbar^2(2j_s+1)^2}\,|j_s=j_d, m_s, m_d\rangle\,. \tag{32}$$

(f) Für einen fixen Wert j_s gilt $m_s=-j_s,\dots,j_s$ und $m_d=-j_s,\dots,j_s$, d.h. es besteht eine $(2j_s+1)^2$-fache Entartung.

Übung 2. *Partnerpotentiale*

Betrachte die beiden Hamiltonoperatoren auf $\mathcal{H}=L^2(\mathbb{R})$

$$H_\pm = -\frac{d^2}{dx^2} + q^2(x) \pm q'(x) \tag{33}$$

für eine reelle Funktion $q(x)$. Zeige:

(a) $H_\pm \geq 0$.

(b) Die Partner $H_\pm$ haben dieselben Eigenwerte λ mit der möglichen Ausnahme von $\lambda=0$.

(c) $\lambda=0$ kann Eigenwert von höchstens einem Partner sein. Für welche $q(x)$ ist dies der Fall? Die Anwort ist "topologisch": sie ändert sich nicht, wenn $q(x)$ auf einem beschränkten Intervall abgeändert wird.

Hinweise: Für welche Funktion $q(x)$ ist (33) mit dem harmonischen Oszillator verwandt? Passe die Definition des Vernichtungsoperators a so an, dass $H_\pm = a_\mp a_\pm$ mit $a_-=a$, $a_+=a^\dagger$, und verwende ihn wie in der Vorlesung. Zu (c): formuliere die Antwort anhand einer Stammfunktion $Q(x)$ von $q(x)$, $(Q'=q)$.

Lösung. Der harmonische Oszillator entspricht im Wesentlichen dem Spezialfall $q(x)=x$:

$$H_\pm = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \pm 1\,.$$

Genauer ist $H_- = 2a^\dagger a$ mit $a, a^\dagger$ wie in der Vorlesung. Der abweichende Faktor 2 wird absorbiert durch die Umdefinition

$$a := q(x) + \frac{d}{dx}, \quad \text{also} \quad a^\dagger = q(x) - \frac{d}{dx}\,,$$

die auch gleich für $q(x) \not\equiv x$ vorgenommen wurde. In der Tat ist nun

$$[a, a^\dagger] = 2\Big[\frac{d}{dx}, q(x)\Big] = 2q'(x)$$

und

$$H_\pm = \begin{cases} aa^\dagger \\ a^\dagger a \end{cases} = -\frac{d^2}{dx^2} + q^2(x) \pm q'(x) \ .$$

(a)

$$\langle\psi| H_- |\psi\rangle = \|a\psi\|^2 \geq 0 \ , \quad \langle\psi| H_+ |\psi\rangle = \left\|a^\dagger\psi\right\|^2 \geq 0$$

(b) Sei $H_- |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle$. Dann gilt

$$H_+ a |\psi\rangle = aa^\dagger a |\psi\rangle = aH_- |\psi\rangle = \lambda a |\psi\rangle \ ,$$

mit

$$\|a\psi\|^2 = \langle\psi| a^\dagger a |\psi\rangle = \langle\psi| H_- |\psi\rangle = \lambda \|\psi\| \ . \tag{34}$$

Ebenso folgt aus $H_+ |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle$, dass $H_- a^\dagger |\psi\rangle = \lambda a^\dagger |\psi\rangle$ mit $\left\|a^\dagger\psi\right\|^2 = \lambda \|\psi\|^2$.
Also: Falls $\lambda \neq 0$, entspricht jedem Eigenvektor von H_- einer von H_+ zum selben Eigenwert λ und umgekehrt. Für die Vielfachheiten gilt somit $n_+ \geq n_-$ und $n_- \geq n_+$, also $n_+ = n_-$.

(c) Aus $H_- |\psi_-\rangle = 0$ folgt nach (34) $a |\psi_-\rangle = 0$, also die Differentialgleichung

$$\frac{d\psi_-}{dx} + q\psi_- = 0 \ ,$$

deren Lösung $\psi_-(x) = \mathrm{e}^{-Q(x)}$ ein Eigenvektor ist, falls sie in $L^2(\mathbb{R})$ liegt. Dabei ist die Stammfunktion $Q(x)$ nur bis auf eine additive Konstante eindeutig (bzw. ψ_- bis auf eine multiplikative). Ebenso folgt aus $H_+ |\psi_+\rangle = 0$, dass $\psi_+ = \mathrm{e}^{Q(x)}$.
Aus der Annahme, ψ_+ und ψ_- seien quadratintegrierbar, folgt, dass

$$\langle\psi_-|\psi_+\rangle = \int \mathrm{e}^{-Q(x)}\mathrm{e}^{Q(x)} dx = \infty$$

endlich ist. Dieser Widerspruch liefert die erste Behauptung. Falls der Träger von $q_1(x) - q_2(x)$ im beschränkten Intervall $[-x_0, x_0]$ liegt, so ist

$$Q_1(x) - Q_2(x) = \begin{cases} C_+, & (x \geq x_0) \\ C_-, & (x \leq -x_0) \end{cases}$$

mit Konstanten $C_\pm$. Ob $\mathrm{e}^{\pm Q(x)} \in L^2(\mathbb{R})$, entscheidet sich in $|x| \geq x_0$, also ohne Unterschied zwischen Q_1 und Q_2.

Übung 3. *Energiespektrum des Wasserstoffatoms*

Ziel der Aufgabe ist es, die Energien der gebundenen Zustände des H-Atoms auf alternativem Wege zu finden (Schrödinger 1940). In Einheiten $\hbar^2/2m = e^2 = 1$ ist der radiale Hamiltonoperator für Wellen mit Drehimpuls $l = 0, 1, 2, \ldots$

$$H_l = -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{1}{r} \qquad \text{auf } L^2[0, \infty) \ .$$

(a) Bestimme E_l so, dass $H_-^{(l)} = H_l - E_l$ von der Form (33) ist und Eigenwert 0 hat.
Hinweis: Wähle den Ansatz $q(r) = a + br^{-1}$.

(b) Zeige: Der Partner ist $H_+^{(l)} = H_{l+1} - E_l$.

(c) Bestimme die (negativen) Eigenwerte von H_l mit Hilfe der Eigenschaften (2a-2c).

Lösung.

(a) Der Ansatz $q(r) = a + br^{-1}$ liefert $q' = -br^{-2}$ und

$$q^2 \pm q' = a^2 + \frac{2ab}{r} + \frac{b^2 \mp b}{r^2} \ . \tag{35}$$

Die Forderung $H_-^{(l)} = H_l - E_l$ bedeutet $a^2 = -E_l$, $2ab = -1$, $b^2 + b = l(l+1)$. Die Lösungen der letzten Gleichung sind

$$b = \begin{cases} l \\ -(l+1) \end{cases} , \qquad \text{und folglich } \ a = \begin{cases} -\frac{1}{2l} \\ \frac{1}{2(l+1)} \end{cases} .$$

Mit $Q(r) = ar + b \log r$ und $\psi_- = \mathrm{e}^{-Q}$ folgt aus $\psi_- \in L^2[0, \infty)$, dass $a > 0$. Somit ist

$$E_l = -\frac{1}{2(l+1)^2} \ .$$

(b) Aus $b^2 - b = (l+1)^2 + (l+1) = (l+1)(l+2)$ und (35) ergibt sich

$$H_+^{(l)} = H_{l+1} - E_l \ .$$

(c) Sei $\varepsilon(H_l)$ die Menge der negativen Eigenwerte von H_l. Nach (c) ist 0 kein Eigenwert von $H_+^{(l)}$. Also nach (b)

$$\varepsilon(H_l) = \varepsilon(H_{l+1}) \cup \{E_l\} \ ,$$

inklusive Vielfachheiten. Rekursiv:

$$\varepsilon(H_l) = \varepsilon(H_{l+k+1}) \cup \{E_l, \dots, E_{l+k}\}$$

und, da nach (a) $H_{l+k+1} \geq E_{l+k+1} \to 0$, $(k \to +\infty)$,

$$\varepsilon(H_l) = \{E_{l+k} \mid k = 0, 1, \dots\} \ ,$$

wie bei der üblichen Lösung.