Übung 1. *[Feinstruktur-Konstante]*

Berechne den Erwartungswert $\langle v^2 \rangle / c^2 = \alpha^2$ *bezüglich des Grundzustandes des Wasserstoffatoms, wobei* $v := \frac{i}{\hbar}[H, r]$ *der Geschwindigkeitsoperator und* c *die Lichtgeschwindigkeit ist. Welchen Zahlenwert hat die dimensionslose Konstante* α*?*

Lösung. Berechne zuerst den Geschwindigkeitsoperator in x-Richtung,

$$v_x = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{-e^2}{r}, x\right] \tag{L.1}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2m}p_i\left[p_i, x\right] + \frac{1}{2m}\left[p_i, x\right]p_i + \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0}\left[\frac{1}{r}, x\right]\right) \tag{L.2}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2m}p_x(-i\hbar) + \frac{1}{2m}(-i\hbar)p_x\right) \tag{L.3}$$

$$= \frac{p_x}{m}\,. \tag{L.4}$$

Daraus folgt,

$$v^2 = \frac{1}{m^2}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) = -\frac{\hbar^2}{m^2}\Delta\,. \tag{L.5}$$

Der Grundzustand ist gegeben durch

$$\psi_{100} = R_{10}Y_{00} = \frac{2}{a^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{r}{a}}\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\,, \tag{L.6}$$

mit dem Bohr-Radius $a = 4\pi\epsilon_0\frac{\hbar^2}{Zme^2}$.

$$\langle v^2 \rangle = \int \psi_{100}^*\, v^2\, \psi_{100}\, d^3r \tag{L.7}$$

$$= \int \psi_{100}^*\left(-\frac{\hbar^2}{m^2}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi_{100}}{\partial r}\right)\right)d^3r \tag{L.8}$$

$$= \int \psi_{100}^*\left(-\frac{\hbar^2}{m^2}\frac{1}{r^2}\left(-\frac{2r}{a} + \frac{r^2}{a^2}\right)\right)\psi_{100}\, d^3r \tag{L.9}$$

$$= \frac{\hbar^2}{m^2 a}\left(-\frac{1}{a} + \int R_{10}^* Y_{00}^* 2r R_{10} Y_{00}\, d\Omega dr\right) \tag{L.10}$$

$$= \frac{\hbar^2}{m^2 a}\left(-\frac{1}{a} + \int_0^\infty R_{10}^* 2r R_{10} dr\right) \tag{L.11}$$

$$= \frac{\hbar^2}{m^2 a}\left(-\frac{1}{a} + \int_0^\infty \frac{4}{a^3}2re^{-\frac{2r}{a}}dr\right) \tag{L.12}$$

$$= \frac{\hbar^2}{m^2 a}\left(-\frac{1}{a} + \frac{4}{a^3}\left(\frac{a^2}{2}\right)\right) \tag{L.13}$$

$$= \frac{\hbar^2}{m^2 a^2} = \frac{e^4}{4\epsilon_0^2 h^2}\,. \tag{L.14}$$

$$\Rightarrow \alpha^2 = \frac{e^4}{4\epsilon_0^2 h^2 c^2} \quad \Rightarrow \quad \alpha \approx \frac{1}{137}\,. \tag{L.15}$$

Übung 2. *[Tritium-Zerfall]*

Ein Tritium-Atom sei im Grundzustand, wenn der Kern plötzlich in einen Helium-Kern zerfällt und dabei ein sehr schnelles Elektron emittiert, das das Atom verlässt ohne das Valenzelektron zu stören. Finde die Wahrscheinlichkeit, dass das resultierende $^3\mathrm{He}^+$*-Ion sich in einem*

(a) 1s Zustand

(b) 2s Zustand

befindet. Welche Auswahlregel lässt sich für die l-Quantenzahl in diesem Übergang finden?

Lösung. Der Unterschied zwischen Tritium und $^3\mathrm{He}^+$ liegt in der Kernladungszahl Z, die für Tritium 1 und für $^3\mathrm{He}^+$ 2 beträgt. Es gilt

$$(\psi_{1s})_{Z=1} = \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} \exp\left(-r/a\right) \;, \tag{L.16}$$

$$(\psi_{1s})_{Z=2} = \left(\frac{8}{\pi a^3}\right)^{1/2} \exp\left(-2r/a\right) \;, \tag{L.17}$$

$$(\psi_{2s})_{Z=2} = \left(\frac{1}{\pi a^3}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{r}{a}\right) \exp\left(-r/a\right) \;. \tag{L.18}$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass das $^3\mathrm{He}^+$ im 1s-Zustand ist, beträgt $|c_{1s}|^2$, wobei

$$c_{1s} \equiv \int d^3r \; (\psi_{1s})^*_{Z=2} \, (\psi_{1s})_{Z=1} \tag{L.19}$$

das Überlappintegral zwischen der Tritium-Grundzustandswellenfunktion und der $^3\mathrm{He}^+$-Wellenfunktion im 1s-Zustand ist.

Damit findet man,

$$\begin{aligned} c_{1s} &= 4\pi \frac{8^{1/2}}{\pi a^3} \int_0^\infty dr\, r^2 \exp\left(-3r/a\right) && \text{(L.20)} \\ &= 2^{7/2} \int_0^\infty dx\, x^2 \exp\left(-3x\right) && \text{(L.21)} \\ &= \frac{2^{9/2}}{3^3} && \text{(L.22)} \\ |c_{1s}|^2 &= \frac{2^9}{3^6} = 0.702\,. && \text{(L.23)} \end{aligned}$$

Analog,

$$\begin{aligned} c_{2s} &= 4\pi \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\infty dr\, r^2 \left(1 - \frac{r}{a}\right) \exp\left(-2r/a\right) && \text{(L.24)} \\ &= 4 \int_0^\infty dx\, x^2 (1-x) \exp\left(-2x\right) && \text{(L.25)} \\ &= -\frac{1}{2} && \text{(L.26)} \\ |c_{2s}|^2 &= 0.25\,. && \text{(L.27)} \end{aligned}$$

Die Auswahlregel lautet $\Delta l = 0$. Dies folgt aus der Tatsache, dass der Winkelanteil der Wellenfunktion eine Kugelflächenfunktion ist, die für verschiedene l-Werte orthogonal zueinander sind.

Übung 3. *[Freies Teilchen im Magnetfeld]*

Der Hamiltonoperator eines freien Teilchens der Masse m und der Ladung q, das sich im Magnetfeld $\mathbf{B}$ mit zugehörigem Vektorpotential $\mathbf{A}$ befindet, lautet

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - q\mathbf{A}\right)^2 .$$

Im Folgenden sei $\mathbf{A}$ gegeben durch $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\left(-By, Bx, 0\right)$ mit $B = const.$

a) *Welche Eichbedingung erfüllt $\mathbf{A}$ und wie lautet das dazugehörige Magnetfeld $\mathbf{B}$?*

b) *Gib den Hamiltonoperator für das gegebene Vektorpotential explizit an und zeige, dass er die Gestalt $H = H_z + H_{xy}$ annimmt. Spalte durch einen Separationsansatz den z-Anteil der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung ab, und gib die Wellenfunktion und den Energiebeitrag dieses Anteils an.*

c) *Zeige, dass der xy-Anteil H_{xy} des Hamiltonoperators mit L_z vertauscht.*

H_{xy} beschreibt einen zweidimensionalen harmonischen Oszillator mit der Kreisfrequenz $\omega = qB/2m$ mit einem Zusatzterm, der proportional zu L_z ist. In Analogie zum eindimensionalen Oszillator führen wir daher zunächst die Operatoren a_x und a_y, sowie deren hermitesch konjugierte ein. Es zeigt sich dann, dass es sinnvoll ist, anstatt a_x und a_y die Linearkombinationen

$$a_r = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_x - \mathrm{i}a_y\right) \qquad \text{und} \qquad a_l = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a_x + \mathrm{i}a_y\right)$$

zu verwenden.

d) *Bestimme die Kommutatoren zwischen $a_r, a_l, a_r^\dagger, a_l^\dagger$.*

e) *Wie lauten H_{xy} und L_z ausgedrückt in diesen Operatoren? Motiviere durch die Betrachtung von L_z die verwendeten Indizes l und r.*

   Hinweis. Führe dazu Besetzungszahloperatoren N_r und N_l ein.

Lösung.

a) Die Eichung ist gegeben durch $\mathrm{div}\mathbf{A} = 0$ (Coulomb Eichung). Das Magnetfeld ist $\mathbf{B} = \mathrm{rot}\mathbf{A} = (0, 0, B)$.

b) Hier benutzen wir, dass $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ und $\mathbf{A} = \mathbf{A}_\perp = A_x\mathbf{e}_x + A_y\mathbf{e}_y$. Für H finden wir dann:

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}\right]^2 \\
&= \frac{1}{2m}\left[\mathbf{e}_x\frac{\hbar}{i}\nabla_x + \mathbf{e}_y\frac{\hbar}{i}\nabla_y + \mathbf{e}_z\frac{\hbar}{i}\nabla_z - q\left(\mathbf{e}_xA_x + \mathbf{e}_yA_y\right)\right]^2 \\
&= \frac{1}{2m}\left(\mathbf{e}_z\frac{\hbar}{i}\nabla_z\right)^2 + \frac{1}{2m}\left[\mathbf{e}_x\frac{\hbar}{i}\nabla_x + \mathbf{e}_y\frac{\hbar}{i}\nabla_y - q\left(\mathbf{e}_xA_x + \mathbf{e}_yA_y\right)\right]^2 ,
\end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt $\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_y = 0 = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_x$ verwendet werde. Der Hamiltonoperator kann dann geschrieben werden als $H = H_z + H_{xy}$, wobei

$$\begin{aligned} H_z &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\,, \\ H_{xy} &= \frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{i}\nabla_\perp - q\mathbf{A}_\perp\right]^2, \end{aligned} \tag{L.28}$$

mit $\nabla_\perp \equiv \mathbf{e}_x\nabla_x + \mathbf{e}_y\nabla_y$. Für die Wellenfunktion machen wir den folgenden Separationsansatz: $\Psi(x,y,z) = \psi(x,y)\chi(z)$. Durch Einsetzen von $\Psi(x,y,z)$ in die Schrödingergleichung ergibt sich

$$H_z\chi(z) = E_z\chi(z), \quad \text{und} \quad H_{xy}\psi(x,y) = E_{xy}\psi(x,y).$$

Die Lösung für den z-Anteil ist dann gegeben durch $\chi(z) = A\mathrm{e}^{ikz} + B\mathrm{e}^{-ikz}$, mit $k = \sqrt{2mE_z/\hbar^2}$. Der Energiebeitrag dieses Anteils ist $E_z = p_z^2/2m$.

c) Mit $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(-By, Bx, 0)$ lässt sich der xy-Anteil des Hamiltonoperators [Glg. (L.28)] explizit schreiben als

$$\begin{aligned} H_{xy} &= \frac{1}{2m}\left[\mathbf{e}_x p_x + \mathbf{e}_y p_y - \frac{qB}{2}\left(x\mathbf{e}_y - y\mathbf{e}_x\right)\right]^2 \\ &= \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2\right) + \frac{q^2B^2}{8m}\left(x^2 + y^2\right) - \frac{qB}{2m}\left(p_y x - y p_x\right). \end{aligned} \tag{L.29}$$

Der Kommutator zwischen H_{xy} und L_z ergibt somit:

$$\begin{aligned} [H_{xy}, L_z] &= \frac{1}{2m}[p_x^2 + p_y^2\,, xp_y - yp_x] + \frac{q^2B^2}{8m}[x^2 + y^2\,, xp_y - yp_x] \\ &= \frac{1}{2m}\left([p_x^2\,, xp_y] - [p_y^2\,, yp_x]\right) + \frac{q^2B^2}{8m}\left([y^2\,, xp_y] - [x^2\,, yp_x]\right) \\ &= 0\,. \end{aligned}$$

Wir haben hier die kanonische Vertauschungsrelationen, sowie $[x, p_x^2] = 2\hbar i p_x$ und $[y, p_y^2] = 2\hbar i p_y$, benutzt.

d) Die einzige nicht-triviale Kommutatoren sind $[a_x, a_x^\dagger] = 1 = [a_y, a_y^\dagger]$. Für die Operatoren a_l und a_r folgt dann direkt:

$$\begin{aligned} [a_r, a_r^\dagger] &= \frac{1}{2}\left[a_x - ia_y\,, a_x^\dagger + ia_y^\dagger\right] = \frac{1}{2}\left([a_x, a_x^\dagger] + [a_y, a_y^\dagger]\right) = 1\,, \\ [a_l, a_l^\dagger] &= \frac{1}{2}\left[a_x + ia_y\,, a_x^\dagger - ia_y^\dagger\right] = \frac{1}{2}\left([a_x, a_x^\dagger] + [a_y, a_y^\dagger]\right) = 1\,, \\ [a_r, a_l] &= \frac{1}{2}\left[a_x - ia_y\,, a_x + ia_y\right] = 0. \end{aligned}$$

Analog findet man $[a_r, a_l^\dagger] = [a_l, a_r^\dagger] = [a_l^\dagger, a_r^\dagger] = 0$.

e) Aus Glg. (L.29) sehen wir, dass sich H_{xy} als $H_{xy} = H_x + H_y - \omega L_z$ schreiben lässt, wobei $H_{x,y}$ der Hamiltonoperator des eindimensionalen harmonischen Oszillators mit $\omega \equiv \frac{qB}{2m}$ ist. Aus

$$H_{x,y} = \hbar\omega\left(a_{x,y}^\dagger a_{x,y} + \frac{1}{2}\right)$$

folgt, dass $H_x + H_y = \hbar\omega(N_x + N_y + 1)$, mit $N_{x,y} = a^\dagger_{x,y} a_{x,y}$. Ausgedrückt durch a_l und a_r Operatoren ($a_x = (a_r + a_l)/2$ und $a_y = i(a_r - a_l)/2$) ergibt sich $N_x + N_y = N_r + N_l$. Analog finden wir für L_z

$$L_z = i\hbar \left(a^\dagger_y a_x - a^\dagger_x a_y \right) = \hbar \left(a^\dagger_r a_r - a^\dagger_l a_l \right) = \hbar \left(N_r - N_l \right), \tag{L.30}$$

und somit kann man $a^\dagger_{r,l}$ als den Erzeugungsoperator von rechts- bzw. links-zirkularen Quanten interpretieren. Somit erhalten wir für den Hamiltonoperator: $H_{xy} = \hbar\omega\left(2N_l + 1\right)$.