

Übung 1. [Tensoroperatoren und das Wigner-Eckart Theorem] (1.5 Punkte)

Ein Vektoroperator \vec{V} wird quantenmechanisch als Größe definiert, die sich unter Drehungen komponentenweise wie

$$V_i \rightarrow \sum_j R_{ij} V_j \quad (1)$$

transformiert, wobei hier R_{ij} eine 3×3 Drehmatrix ist.

Man kann nun (1) verallgemeinern und durch die Transformation

$$T_{ijk\dots} \rightarrow \sum_{i'j'k'\dots} R_{ii'} R_{jj'} R_{kk'} T_{i'j'k'\dots} \quad (2)$$

einen kartesischen Tensor definieren, wobei die Anzahl der Indizes den Rang des Tensors angibt.

- a) Betrachte als Beispiel den Tensor $T_{ij} = V_i U_j$, mit U_i und V_j als Einträge zweier Vektoren \vec{U} und \vec{V} . Zerlege T_{ij} in Komponenten, die sich wie ein Skalar, ein antisymmetrischer und ein symmetrischer Tensor unter Rotationen verhalten. Vergewissere dich, dass das so erhaltene Objekt die selbe Anzahl Freiheitsgrade wie T_{ij} hat, und vergleiche mit der Multiplizität die man für Objekte mit Bahndrehimpuls $\ell = 0, 1, 2$ erhält.

Basierend auf der Zerlegung von (2) in Beiträge zu unterschiedlichen Bahndrehimpulsen kann man nun einen sphärischen Tensor $T_q^{(k)}$ vom Rang k , $q = -k, \dots, k$, durch die Kommutationsrelationen

$$[J_z, T_q^{(k)}] = \hbar q T_q^{(k)}, \quad (3)$$

$$[J_{\pm}, T_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q \pm 1}^{(k)}, \quad (4)$$

definieren. \vec{J} bezeichnet hier den Gesamtdrehimpuls des betrachteten Systems, J_z seine z -Komponente und J_{\pm} die üblichen Auf- und Absteigeoperatoren.

- b) Sei $|jm\rangle$ ein Eigenvektor zu \vec{J}^2 und J_z mit Eigenwerten $\hbar^2 j(j+1)$ und $m\hbar$. Zeige die m -Auswahlregel

$$\langle j'm' | T_q^{(k)} | jm \rangle = 0, \quad \text{für } m' \neq q + m. \quad (5)$$

- c) Leite nun mit Hilfe von (3) und (4) eine Rekursionsbeziehung für die Matrixelemente $\langle j'm' | T_q^{(k)} | jm \rangle$ her.

- d) Vergleiche die in c) gewonnene Rekursionsbeziehung mit der Rekursionsbeziehung für Clebsch-Gordon Koeffizienten

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j, m \pm 1 \rangle \\ &= \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \langle j_1 j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \\ &+ \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \langle j_1 j_2; m_1, m_2 \mp 1 | j_1 j_2; jm \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

und leite daraus das Wigner-Eckart Theorem

$$\langle j'm' | T_q^{(k)} | jm \rangle = \langle jk; mq | jk; j'm' \rangle \frac{\langle j' | | T^{(k)} | | j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \quad (7)$$

her, wobei das reduzierte Matrixelement $\langle j' | | T^{(k)} | | j \rangle$ nicht von m, m', q abhängt.

Lösung.

(a)

$$U_i V_j = \frac{\vec{U} \cdot \vec{V}}{3} \delta_{ij} + \frac{(U_i V_j - U_j V_i)}{2} + \left(\frac{(U_i V_j + U_j V_i)}{2} - \frac{\vec{U} \cdot \vec{V}}{3} \delta_{ij} \right) \quad (\text{L.1})$$

Der erste Term ist ein Skalar (rotationsinvariant), so erhält man nur eine unabhängige Komponente ($\ell = 0$). Der zweite Term ist anti-symmetrisch ($\propto \epsilon_{ijk} (\vec{u} \times \vec{v})_k$), so erhält man drei unabhängige Komponenten ($\ell = 1$). Der dritte Term ist symmetrisch und spurlos, so haben wir insgesamt fünf unabhängige Komponenten ($\ell = 2$).

(b) Mit Gl. (3) erhält man

$$\langle j' m' | [J_z, T_q^{(k)}] - \hbar q T_q^{(k)} | j m \rangle = 0 \quad (\text{L.2})$$

$$\langle j' m' | [J_z, T_q^{(k)}] - \hbar q T_q^{(k)} | j m \rangle = [(m' - m)\hbar - \hbar q] \langle j' m' | T_q^{(k)} | j m \rangle \quad (\text{L.3})$$

$$\implies \langle j' m' | T_q^{(k)} | j m \rangle = 0 \text{ für } m' \neq q + m. \quad (\text{L.4})$$

(c) Aus Gl. (4) folgt

$$\langle j' m' | [J_{\pm}, T_q^{(k)}] | j m \rangle = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle j' m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | j m \rangle \quad (\text{L.5})$$

und zusammen mit $J_{\pm} | j m \rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} | j m \pm 1 \rangle$, findet man

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle j' m' \mp 1 | T_q^{(k)} | j m \rangle = \\ & \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j' m' | T_q^{(k)} | j m \pm 1 \rangle + \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle j' m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | j m \rangle \end{aligned} \quad (\text{L.6})$$

(d) Senden wir $j' \rightarrow j$, $m' \rightarrow m$, $j \rightarrow j_1$, $m \rightarrow m_1$, $k \rightarrow j_2$, $q \rightarrow m_2$ und vergleichen wir es mit Gl. (6), finden wir Gleichungen der Form

$$\sum a_{ij} x_j = 0 \text{ und } \sum a_{ij} y_j = 0 \quad (\text{L.7})$$

Diese Gleichungen können nicht direkt gelöst werden, aber die folgende Verhältnisse lassen sich bestimmen

$$\frac{x_j}{x_k} = \frac{y_j}{y_k} \implies x_j = c y_j \text{ mit } c = \text{const.} \quad (\text{L.8})$$

Der Clebsch-Gordon Koeffizient $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 \pm 1 | j_1 j_2; j m \rangle$ korrespondiert zu $\langle j' m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | j m \rangle$, so

$$\langle j' m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | j m \rangle = \text{const.} \times \langle j_1 j_2; m_1 m_2 \pm 1 | j_1 j_2; j m \rangle, \quad (\text{L.9})$$

das heisst

$$\langle j' m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | j m \rangle = \text{const.} \times \langle j k; m q | j k; j' m' \rangle \quad (\text{L.10})$$

Übung 2. [Stark-Effekt] (1.5 Punkte)

Wenn ein Atom sich in einem homogenen elektrischen Feld \vec{E}_{ext} befindet, werden die Energieniveaus verschoben. Dieses Phänomen ist das elektrische Analogon zum Zeeman-Effekt und wird als Stark-Effekt bezeichnet. In dieser Aufgabe betrachten wir den Stark-Effekt für die Zustände $n = 1$ und $n = 2$ des Wasserstoffatoms. O.B.d.A. zeige das elektrische Feld in die z -Richtung, so dass die potentielle Energie des Elektrons

$$H'_S = eE_{ext}z \quad (8)$$

ist. Behandle diese Kopplung als Störoperator zu dem Bohr'schen Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms $H_0\psi_{nlm} = E_n^{(0)}\psi_{nlm}$. Im Folgenden benutzen wir die Notation $|n, \ell, m\rangle$ für die Zustände, die durch die Wellenfunktion ψ_{nlm} beschrieben werden.

- Leite die Auswahlregeln $m' = m$ und $|\ell' - \ell| = 1$ für das Matrixelement $\langle n', \ell', m' | z | n, \ell, m \rangle$ her. Nutze hierfür: $[L^2, [L^2, \vec{x}]] = 2\hbar^2 (\vec{x}L^2 + L^2\vec{x})$.
- Zeige, dass somit der Grundzustand in erster Ordnung von der Störung nicht verändert wird.
- Der erste angeregte Zustand mit Energie $E_2^{(0)}$ ist vierfach entartet unter den $n = 2$ Eigenzuständen mit Wellenfunktionen ψ_{200} , ψ_{21-1} , ψ_{210} und ψ_{211} . Verwende die Störungstheorie für einen entarteten Energieeigenwert und bestimme die Korrekturen in erster Ordnung zur Energie $E_2^{(0)}$. Wieviele nichtentartete Niveaus gibt es nach der Aufspaltung?

Lösung.

- Die Auswahlregel für m folgt direkt aus $[z, L_z] = 0$:

$$0 = \langle n', \ell', m' | [z, L_z] | n, \ell, m \rangle = \langle n', \ell', m' | zL_z - L_zz | n, \ell, m \rangle \quad (L.11)$$

$$= \hbar(m - m') \langle n', \ell', m' | z | n, \ell, m \rangle$$

Somit kann $\langle n', \ell', m' | z | n, \ell, m \rangle$ nur für $m = m'$ verschieden von null sein.

Für die Auswahlregel in ℓ benutzen wir die in Übung 1, Serie 7 hergeleitete Relation $[L^2, [L^2, \vec{x}]] = 2\hbar^2 (\vec{x}L^2 + L^2\vec{x})$:

$$\begin{aligned} \langle n', \ell', m' | L^2L^2\vec{x} + \vec{x}L^2L^2 - 2L^2\vec{x}L^2 | n, \ell, m \rangle &= 2\hbar^2 \langle n', \ell', m' | \vec{x}L^2 + L^2\vec{x} | n, \ell, m \rangle \\ \Rightarrow ((\ell'(\ell' + 1))^2 + (\ell(\ell + 1))^2 - 2\ell(\ell + 1)\ell'(\ell' + 1)) \langle n', \ell', m' | \vec{x} | n, \ell, m \rangle \\ &= 2(\ell'(\ell' + 1) + \ell(\ell + 1)) \langle n', \ell', m' | \vec{x} | n, \ell, m \rangle \quad (L.12) \\ \Rightarrow \ell'^2(\ell' + 1)^2 + \ell^2(\ell + 1)^2 - 2\ell'(\ell' + 1)\ell(\ell + 1) - 2\ell'(\ell' + 1) - 2\ell(\ell + 1) &= 0 \\ \Rightarrow (\ell + \ell')(\ell + \ell' + 2)((\ell - \ell')^2 - 1) &= 0 \end{aligned}$$

Da $\ell, \ell' \geq 0$, folgt aus der letzten Gleichung $|\ell - \ell'| = 1$. Im Fall $\ell = \ell' = 0$ kann durch Betrachten von Paritätseigenschaften der Wellenfunktionen und des Ortsoperators gezeigt werden, dass $\langle n'00 | \vec{x} | n00 \rangle = 0$.

- Der Grundzustand des Wasserstoffatoms ist durch $|100\rangle$ beschrieben. Die Korrektur zur Grundzustandsenergie in erster Ordnung in der Störung ist durch

$$E_{|100\rangle}^{(1)} = \langle 100 | H'_S | 100 \rangle = eE_{ext} \langle 100 | z | 100 \rangle = 0 \quad (L.13)$$

gegeben, wobei wir die in a) hergeleitete Auswahlregel für die ℓ -Quantenzahl benutzt haben. Somit wird der Grundzustand in erster Ordnung nicht verändert.

- c) Um den Stark-Effekt zum ersten angeregten Zustand der Energie $E_2^{(0)}$ zu bestimmen, benötigen wir die Eigenfunktionen der entarteten Zustände ψ_{200} , ψ_{21-1} , ψ_{210} und ψ_{211} . Sie sind gegeben durch

$$\psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{1}{2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a} \quad (\text{L.14})$$

$$\psi_{211} = -\frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{1}{8a^2} r e^{-r/2a} \sin \theta e^{i\phi} \quad (\text{L.15})$$

$$\psi_{210} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{1}{4a^2} r e^{-r/2a} \cos \theta \quad (\text{L.16})$$

$$\psi_{21-1} = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{1}{8a^2} r e^{-r/2a} \sin \theta e^{-i\phi}. \quad (\text{L.17})$$

Die Korrekturen zu $E_2^{(0)}$ sind dann die Lösungen des Eigenwertproblems $H'_S |\psi\rangle = E_s |\psi\rangle$, eingeschränkt auf die entarteten Energiezustände von oben. Wir müssen deshalb alle Matrixelemente von H'_S in diesem vierdimensionalen Raum bilden und die resultierende 4×4 -Matrix W diagonalisieren. Wir führen deshalb die Notation $|1\rangle \equiv |200\rangle$, $|2\rangle \equiv |21-1\rangle$, $|3\rangle \equiv |210\rangle$ und $|4\rangle \equiv |211\rangle$ um diesen entarteten vierdimensionalen Raum kompakt zu beschreiben. Wir suchen $W_{ij} = \langle i | H'_S | j \rangle$. Wegen der Winkelintegration sind fast alle Matrixelemente von H'_S Null, ausser $\langle 1 | H'_S | 3 \rangle = \langle 3 | H'_S | 1 \rangle$:

$$\langle 1 | H'_S | 1 \rangle = [\dots] \int_0^\pi d\theta \cos \theta \sin \theta = 0 \quad (\text{L.18})$$

$$\langle 2 | H'_S | 2 \rangle = [\dots] \int_0^\pi d\theta \sin^2 \theta \cos \theta \sin \theta = 0 \quad (\text{L.19})$$

$$\langle 3 | H'_S | 3 \rangle = [\dots] \int_0^\pi d\theta \cos^2 \theta \cos \theta \sin \theta = 0 \quad (\text{L.20})$$

$$\langle 4 | H'_S | 4 \rangle = [\dots] \int_0^\pi d\theta \sin^2 \theta \cos \theta \sin \theta = 0 \quad (\text{L.21})$$

$$\langle 1 | H'_S | 2 \rangle = [\dots] \int_0^{2\pi} d\phi e^{i\phi} = 0 \quad (\text{L.22})$$

$$\langle 1 | H'_S | 4 \rangle = [\dots] \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i\phi} = 0 \quad (\text{L.23})$$

$$\langle 2 | H'_S | 3 \rangle = [\dots] \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i\phi} = 0 \quad (\text{L.24})$$

$$\langle 2 | H'_S | 4 \rangle = [\dots] \int_0^{2\pi} d\phi e^{-2i\phi} = 0 \quad (\text{L.25})$$

$$\langle 3 | H'_S | 4 \rangle = [\dots] \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i\phi} = 0 \quad (\text{L.26})$$

Dies ist in Einklang mit den in Aufgabenteil a) hergeleiteten Auswahlregeln.

Das verbleibende Matrixelement ist

$$\langle 1 | H'_S | 3 \rangle = eE_{ext} \frac{1}{16\pi a^4} \int r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \left(1 - \frac{r}{2a} \right) e^{-r/2a} r e^{-r/2a} \cos \theta (r \cos \theta) \quad (\text{L.27})$$

$$= \frac{eE_{ext}}{8a^4} \left[\int_0^\pi d\theta \cos^2 \theta \sin \theta \right] \int_0^\infty dr \left(1 - \frac{r}{2a} \right) e^{-r/a} r^4 \quad (\text{L.28})$$

$$= \frac{eE_{ext}}{12a^4} \int_0^\infty dr \left(e^{-r/a} r^4 - \frac{1}{2a} \int_0^\infty e^{-r/a} r^5 \right) \quad (\text{L.29})$$

$$= \frac{eE_{ext}}{12a^4} \left(4!a^5 - \frac{1}{2a} 5!a^6 \right) \quad (\text{L.30})$$

$$= \frac{eE_{ext}}{12a^4} 24a^5 \left(1 - \frac{5}{2} \right) \quad (\text{L.31})$$

$$= -3aeE_{ext}. \quad (\text{L.32})$$

Die W -Matrix ist somit

$$W = -3aeE_{ext} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{L.33})$$

Die charakteristische Gleichung dieser Matrix ist

$$\det(W - \lambda 1_4) = 0 \quad \Rightarrow \quad -\lambda(-\lambda)^3 + (-\lambda^2) = \lambda^2(\lambda^2 - 1) = 0 \quad (\text{L.34})$$

und die Eigenwerte sind somit 0 (zweidimensionaler Eigenraum), 1 und -1 . Die gestörten Energie sind dann $E_2^{(0)}$ (zweifach entartet), $E_2^{(0)} + 3aeE_{ext}$ und $E_2^{(0)} - 3aeE_{ext}$ (beide nicht-entartet). Durch den Stark-Effekt wird die Entartung somit nicht vollständig aufgehoben. Der 4-fach entartete erst angeregte Zustand wird in drei verschiedenen Energieniveaus aufgespalten.