Übungsblatt 1 IK4

Aufgabe 1: Bohrsches Atommodell

a) Im Zentralpotential der Punktladung $Q = +Ze$ wirkt die Kraft des elektrischen Feldes als Zentripetalkraft. Es ist

$$-\frac{m_e v^2}{r} = F = \frac{Ze \cdot (-e)}{r^2}$$

Für das Elektron auf der Kreisbahn stehen Ortsvektor und Geschwindigkeitsvektor senkrecht aufeinander, so dass gilt

$$n\hbar = L = \vec{r} \times \vec{p} = r_n \cdot p = m_e r_n v$$

Hieraus ergibt sich

$$\frac{Ze \cdot e}{r_n^2} = \frac{m_e}{r_n}\left(\frac{n\hbar}{m_e r_n}\right)^2 \quad \Rightarrow \quad r_n = \frac{n^2\hbar^2}{Ze^2 m_e} = \frac{n^2}{Z\frac{e^2}{\hbar c}}\frac{\hbar}{m_e c}$$

Mit den Substitutionen $\lambda_c = \frac{\hbar}{m_e c}$ und $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ ist so

$$r_n = \frac{n^2}{Z\alpha}\lambda_c$$

Für die kinetische Energie des Elektrons auf der Kreisbahn gilt hier

$$T = \frac{1}{2}m_e v^2 = \frac{1}{2}m_e\left(\frac{n\hbar}{m_e r_n}\right)^2 = \frac{1}{2}\frac{n^2\hbar^2}{m_e\frac{n^4}{(Z\alpha)^2}\frac{\hbar^2}{m_e^2c^2}} = \frac{1}{2}m_e c^2\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}$$

Die potentielle Energie ergibt sich als

$$V = -\frac{Ze^2}{r_n} = -\frac{Z^2e^2\alpha}{n^2\lambda_c} = -\frac{Z^2\alpha e^2}{n^2\frac{\hbar}{m_e c}} = -m_e c^2\frac{Z^2\alpha}{n^2}\frac{e^2}{\hbar c} = -m_e c^2\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}$$

Somit ergibt sich die Gesamtenergie eines Elektrons

$$E_n = T + V = -\frac{1}{2}m_e c^2\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}$$

Für die Frequenz einer emittierten Strahlung ν für einen Übergang E_n zu E_m gilt

$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h} = -\frac{1}{2h}m_e c^2\frac{(Z\alpha)^2}{n^2} + \frac{1}{2h}m_e c^2\frac{(Z\alpha)^2}{m^2} = -\frac{1}{2h}m_e c^2(Z\alpha)^2\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right)$$

Es ist also $\nu \propto \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}$.

b) Für die Kreisbahngeschwindigkeit v_n folgt aus der Drehimpulsquantisierung

$$v_n = \frac{n\hbar}{m_e r_n} = \frac{n\hbar}{m_e\frac{n^2}{Z\alpha}\frac{\hbar}{m_e c}} = \frac{Z\alpha}{n}c$$

oder äquivalent

$$\frac{v_n}{c} = \frac{Z\alpha}{n}$$

c) Der Bahnradius eines Elektrons im Wasserstoffatom ($Z = 1$) ergibt sich hier zu

$$r_1 = \frac{1^2}{1 \cdot \alpha} \lambda_c = 137 \cdot 3.9 \cdot 10^{-11} cm \approx 5.343 \cdot 10^{-9} cm$$

Die Energie des Elektrons auf dieser Kreisbahn ergibt sich als

$$E_1 = -\frac{1}{2} m_e c^2 \frac{(1 \cdot \alpha)^2}{1^2} = -\frac{1}{2} 0.51 MeV \cdot \frac{1}{137^2} \approx -13.58 eV$$

Die Frequenz einer emittierten Strahlung von $2 \to 1$ ergibt sich hier als

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h} = -\frac{1}{2h} m_e c^2 (\alpha)^2 \left(\frac{1}{2^2} - 1 \right) = \frac{3}{8} \frac{0.51 MeV}{137^2 \cdot 4.135 \cdot 10^{-15} eV s} \approx 2.5 \cdot 10^{15} \frac{1}{s}$$

d) Betrachtet man die Differenz der Energien benachbarter Bahnen, also

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = -\frac{1}{2} m_e c^2 (Z\alpha)^2 \left(\frac{1}{(n+1)^2} - \frac{1}{n^2} \right) = \underbrace{\frac{1}{2} m_e c^2 (Z\alpha)^2}_{=R} \frac{2n+1}{(n+1)^2 n^2}$$

für große n, also für $n \to \infty$, so gilt

$$\Delta E_n = R \frac{2n+1}{(n+1)^2 n^2} \xrightarrow{n \to \infty} R \frac{2n}{n^4} = 0$$

Für große n geht das Energiespektrum also zusehens von einem diskreten Spektrum in ein kontinuierliches über. Die Energie eines freien Elektrons ist hier durch $E = 0$ festgelegt.

Übungsblatt 2 IK4

Aufgabe 1: Erwartungswerte

a) Für das Betragsquadrat der Angegebenen Wellenfunktion gilt

$$\begin{aligned}
|\psi(x,t)|^2 &= \left|\frac{N}{b}e^{ik_0(x-r)}e^{-\frac{(x-r)^2}{4b^2}}\right|^2 = \frac{|N|^2}{|b|^2}\left|e^{-\frac{(x-r)^2}{4b^2}}\right|^2 \\
&= \frac{|N|^2}{|b|^2}\left|e^{-\frac{(x-r)^2 b^*}{4|b^2|^2}}\right|^2 = \frac{|N|^2}{|b|^2}e^{-\frac{(x-r)^2 \Re b}{2|b^2|^2}}
\end{aligned}$$

Somit ergibt sich für das Integral über $|\psi|^2$

$$\begin{aligned}
1 &\stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{|N|^2}{|b|^2}e^{-\frac{(x-r)^2\Re b}{2|b^2|^2}} = \frac{|N|^2}{|b|^2}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{(x-r)^2\Re b}{2|b^2|^2}}}_{=\sqrt{\frac{2\pi|b|^4}{\Re b^2}}} \\
&= |N|^2\sqrt{\frac{2\pi}{\Re b^2}} = |N|^2\sqrt{8\pi a^2}
\end{aligned}$$

Hieraus lässt sich N als $N = (8\pi a^2)^{-.25}$ bestimmen.

b) Für den Erwartungswert des Ortes im Zustand ψ gilt, da ψ durch die Bestimmung von N normiert wurde

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^* x\psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{N}{b^*}e^{-ik_0(x-r)}e^{-\frac{(x-r)^2}{4b^{*2}}}x\frac{N}{b}e^{ik_0(x-r)}e^{-\frac{(x-r)^2}{4b^2}} \\
&= \frac{N^2}{|b|^2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\cdot e^{-\frac{(x-r)^2(b^2+b^{*2})}{4|b^2|^2}} = \frac{N^2}{|b|^2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, (x+r)\cdot e^{-\frac{x^2\Re b^2}{4|b^2|^2}} \\
&= \frac{N^2}{|b|^2}\left(\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\cdot e^{-\frac{x^2\Re b^2}{4|b^2|^2}}}_{=0} + r\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \cdot e^{-\frac{x^2\Re b^2}{4|b^2|^2}}}_{=\sqrt{\frac{2\pi|b|^4}{\Re b^2}}}\right) = N^2 r\sqrt{\frac{2\pi}{\Re b^2}} \\
&= rN^2\sqrt{8\pi a^2} = r
\end{aligned}$$

c) Das Quadrat der Ortsunschärfe ergibt sich ebenfalls aufgrund der normierten Wellenfunktion als

$$
\begin{aligned}
(\Delta x)^2 &= <(x-<x>)^2>=\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi^*(x-r)^2\psi = ... \\
&= \frac{N^2}{|b|^2}\int_{-\infty}^{\infty} dx(x-r)^2\cdot e^{-\frac{(x-r)^2}{4|b^2|^2}\Re b^2} = \frac{N^2}{|b|^2}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx\,x^2\cdot e^{-\frac{x^2}{4|b^2|^2}\Re b^2}}_{=\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\frac{4|b^2|^2}{\Re b^2}\right)^{\frac{3}{2}}} \\
&= \frac{N^2}{|b|^2}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\frac{4\left|b^2\right|^2}{\Re b^2}\right)^{\frac{3}{2}} = \frac{4N^2\left|b^2\right|^2\sqrt{\pi}}{(\Re b^2)^{3/2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}16a^2\left|b^2\right|^2 \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{4a^2\hbar^2t^2}{m^2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{m^2+4a^2\hbar^2t^2}{a^2m^2}
\end{aligned}
$$

Die Ortsunschärfe ergibt sich hieraus nun zu

$$\Delta x = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{m^2+4a^2\hbar^2t^2}{a^2m^2}}$$

Übungsblatt 3 IK4

Aufgabe 1: Periodisches Potential

a) Im periodichen Potential $V(x)$ ergeben sich für die Wellenfunktion $\psi(x)$ aus der Schrödingergleichung die Differentialgkleichungen für das Intervall $[-b, a]$:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi & 0 < x < a \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi & -b < x < 0 \end{cases}$$

Hieraus ergeben sich die Ansätze für die Wellenfunktion im Intervall $[-b, a]$ als

$$\psi(x) = \begin{cases} A_+e^{ikx} + A_-e^{-ikx} & 0 < x < a \\ B_+e^{\kappa x} + B_-e^{-\kappa x} & -b < x < 0 \end{cases}$$

Die Forderung der stetigen Differenzierbarkeit der Wellenfunktion im Punkt $x = 0$ liefert nun die Randbedingung

$$A_+ + A_- - B_+ - B_- = 0$$

aus der Stetigkeit der Funktion sowie

$$ikA_+ - ikA_- - \kappa B_+ \kappa B_- = 0$$

aus der Stetigkeit von $\psi'|_0$. Die Stetigkeit von $\psi|_{-b}$ und $\psi'|_{-b}$ sowie die Periodizitätsbedingung $\psi(x+d) = \psi(x)$ liefern nun

$$B_+e^{-\kappa b} + B_-e^{\kappa b} = A_+e^{-ikb} + A_-e^{ikb} = e^{i\phi}\left[A_+e^{ika} + A_-e^{-ika}\right]$$

und

$$\kappa B_+e^{-\kappa b} - \kappa B_-e^{\kappa b} = ikA_+e^{-ikb} - ikA_-e^{ikb} = iKe^{i\phi}\left[A_+e^{ika} - A_-e^{-ika}\right]$$

Zur Bestimmung der unbkannten Koeffitienten erhällt man aus den oben genannten Bedingungen ein Lineares Gleichungssystem der Form

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ ik & -ik & -\kappa & \kappa \\ e^{i\phi}e^{ika} & e^{i\phi}e^{-ika} & -e^{-\kappa b} & -e^{\kappa b} \\ ike^{i\phi}e^{ika} & -ike^{i\phi}e^{-ika} & -\kappa e^{-\kappa b} & \kappa e^{\kappa b} \end{pmatrix}}_{:=M} \begin{pmatrix} A_+ \\ A_- \\ B_+ \\ B_- \end{pmatrix} = 0$$

Die Forderung einer nicht trivialen Lösung der Wellenfunktion ist nur dann zu erfüllen, wenn die Determinante der Koeffitientenmatrix M der verschwindet. Es muss also gelten

$$\begin{aligned} 0 \;&=\; \det(M) = \\ &\quad 4ik\kappa + \kappa^2e^{-ika}e^{i\phi}(e^{\kappa b} - e^{-\kappa b}) - 2ik\kappa e^{-ika}e^{i\phi}(e^{\kappa b} + e^{-\kappa b}) - k^2e^{-ika}e^{i\phi}(e^{\kappa b} - e^{-\kappa b}) \\ &+\; 4ik\kappa e^{2i\phi} - \kappa^2e^{ika}e^{i\phi}(e^{\kappa b} - e^{-\kappa b}) - 2ik\kappa e^{ika}e^{i\phi}(e^{\kappa b} + e^{-\kappa b}) + k^2e^{ika}e^{i\phi}(e^{\kappa b} - e^{-\kappa b}) \\ &=\; 4ik\kappa(1 + e^{2i\phi}) - \kappa^2e^{i\phi}(e^{ika} - e^{-ika})(e^{\kappa b} - e^{-\kappa b}) - 2ik\kappa e^{i\phi}(e^{ika} + e^{-ika})(e^{\kappa b} + e^{-\kappa b}) \\ &\quad +k^2e^{i\phi}(e^{ika} - e^{-ika})(e^{\kappa b} - e^{-\kappa b}) \end{aligned}$$

Mit den Definitionen der Kreisfunktionen bzw. der hyperbolischen Funktionen mit der Exponentialfunktion lässt sich die die Bedingung nun weiter vereinfachen.

$$
\begin{aligned}
0 &= 4ik\kappa(1+e^{2i\phi}) + 4i(k^2-\kappa^2)e^{i\phi}\sin(ka)\sinh(\kappa b) - 8ik\kappa e^{i\phi}\cos(ka)\cosh(\kappa b) \\
\Rightarrow &\quad \cos(\phi) = \frac{1+e^{2i\phi}}{2e^{i\phi}} = \cos(ka)\cosh(\kappa b) - \frac{k^2-\kappa^2}{2k\kappa}\sin(ka)\sinh(\kappa b)
\end{aligned}
$$

b) Betrachtet man nun den Grenzfall eines periodischen δ-Potentials, also $b \to 0$ und $V_0 \to \infty$ mit $V_0 \cdot b < \infty$, so ergibt sich für die Argumente der hyperbolischen Funktionen

$$\kappa b = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)b} \to 0$$

Dies rechtfertigt eine Taylorentwicklung von

$$\cosh(\kappa b) \doteq \underbrace{\cosh(0)}_{=1} + \underbrace{\sinh(0)}_{=0} \cdot (\kappa b) + ... \qquad \sinh(\kappa b) \doteq \sinh(0) + \cosh(0)\kappa b + ...$$

Eingesetzt in die Gleichung zur Bestimmung der Energieeigenwerte ergibt sich so

$$\cos(\phi) = \cos(ka) - \lim_{\substack{b\to 0 \\ V_0\to\infty}} \left(\underbrace{\frac{kb}{2}}_{\to 0} - \frac{\kappa^2}{2k} b \right) \sin(ka) = \cos(ka) + \lim_{\substack{b\to 0 \\ V_0\to\infty}} \frac{\kappa^2}{2k} b \sin(ka)$$

Mit der Definition von P nach der Aufgabenstellung ergibt sich

$$\cos(\phi) = \cos(ka) + \frac{P}{ka}\sin(ka)$$

Das mögliche Energiespektrum hängt nun vom Wert der Konstanten P und ϕ. Auch ohne den Wert genau zu kennen, kann ein Energiewert, der der Bedingung $ka < \pi/4$ genügt augeschlossen werden. Dies folgt aus der Betrachtung des Grenzwertes für $E \to 0$ der rechten Seite, die hier den Wert $1+P$ annimmt und dem Wertebereich des Cosinus von $-1 < \cos(\phi) < 1$, sowie dem Maximum der Funktion $\sin(ka) + \cos(ka)$.
Die Energiewerte im Bereich bestimmt durch $P \approx ka$ können nur numerisch errechnet werden.
Für große Energien, also $ka >>> P$ ergeben sich die möglichen Energiewerte aus $\cos(ka) = \cos(\phi)$. Hierbei ist zu beachten, dass sowohl $ka = \phi$ als auch $ka = 2\pi - \phi$ die Energiewerte in einer Periode des Cosinus liefern. Daraus ergeben sich die Energiewerte zu

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2ma} n^2 \begin{cases} \phi^2 & n \text{ gerade} \\ (2\pi-\phi)^2 & n \text{ ungerade} \end{cases} \qquad 1 << n \in \mathbb{N}$$

Für die speziellen Werte von $\phi \in \{-\pi, 0, \pi\}$ ist nur jeweils ein Energiewert

$$E_n = \frac{(\hbar(2\pi - \phi)n)^2}{2ma}$$

in einer Periode des Cosinus zu finden.

Übungsblatt 4 IK4

Aufgabe 1: Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

a) Für das Produkt aus Erzeugungs und Vernichtungsoperator ergibt sich

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{\partial}{\partial x}\right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(x^2 - \frac{\hbar}{m\omega}\left(x\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x\right) - \frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \\ &= \frac{1}{\hbar\omega}\underbrace{\left(\frac{m}{2}\omega^2 x^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)}_{=H} - \frac{i}{2\hbar}\underbrace{(xp - px)}_{=[x,p]=i\hbar} = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Hieraus ergibt sich für den Hamilton-Operator

$$H = \hbar\omega\left(b^\dagger b + \frac{1}{2}\right)$$

b) Für die Eigenfunktion ψ_n des Hamilton-Operators zum Energiewert E_n gilt

$$a^\dagger a\psi_n = \left(\frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2}\right)\psi_n = \left(\frac{1}{\hbar\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}\right)\psi_n = n\psi_n$$

c) Der Kommutator des Vernichtungs- mit dem Erzwugungsoperatoren ergibt sich mit einer analogen Überlegung für das Produkt $bb^\dagger$ als

$$[b, b^\dagger] = bb^\dagger - b^\dagger b = \frac{H}{\omega\hbar} + \frac{1}{2} - \frac{H}{\omega\hbar} + \frac{1}{2} = 1$$

Der Kommutator des Hailton-Operators mit dem Erzeugungsoperator ergibt sich als

$$\begin{aligned} [H, b^\dagger] &= Hb^\dagger - b^\dagger H = \hbar\omega\left(b^\dagger b + \frac{1}{2}\right)b^\dagger - \hbar\omega b^\dagger\left(b^\dagger b + \frac{1}{2}\right) \\ &= \hbar\omega\left((b^\dagger b)b^\dagger - b^\dagger(b^\dagger b) + \frac{1}{2}b^\dagger - \frac{1}{2}b^\dagger\right) = \hbar\omega[b^\dagger b, b^\dagger] \\ &= \hbar\omega\underbrace{[b^\dagger, b^\dagger]}_{=0}b + \hbar\omega b^\dagger\underbrace{[b, b^\dagger]}_{=1} = \hbar\omega b^\dagger \end{aligned}$$

Analog kann gezeigt werden, dass

$$[H, b] = -\hbar\omega b$$

Wendet man nun den Hamilton-Operator auf $b^\dagger\psi_n$ bzw. $b\psi_n$ an so ergibt sich

$$\begin{aligned} Hb^\dagger\psi_n &= [H, b^\dagger]\psi_n + b^\dagger H\psi_n = \hbar\omega b^\dagger\psi_n + b^\dagger E_n\psi_n \\ &= \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega b^\dagger\psi_n = E_{n+1}b^\dagger\psi_n \\ Hb\psi_n &= [H, b]\psi_n + bH\psi_n = -\hbar\omega b\psi_n + bE_n\psi_n \\ &= \left(n - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega b\psi_n = E_{n-1}b\psi_n \end{aligned}$$

Wir haben also mit $b^\dagger \psi_n$ bzw. $b\psi_n$ eine Eigenfunktion zum den Energieeigenwerten E_{n+1} bzw. E_{n-1} gefunden. Da hier keine entarteten Eigenwerte erwartet werden, müssen die gefundenen Eigenfunktionen skalare vielfache der normierten Eigenfunktionen ψ_{n+1} bzw. ψ_{n-1} sein. Es folgt aus $\alpha\psi_{n+1} = b^\dagger \psi_n$für den Koeffitienten α:

$$\begin{aligned}
\int dx\, |\alpha\psi_{n+1}|^2 &= \int dx \left| b^\dagger \psi_n \right|^2 = \int dx (d\psi_n^*)(d^\dagger \psi_n) = \int dx\, \psi_n^* d d^\dagger \psi_n \\
\alpha^2 &= \int dx\, \psi_n^*([b, b^\dagger] + b^\dagger b)\psi_n = \int dx\, \psi_n^*(1+n)\psi_n = \int dx\, |\psi_n|^2 (n+1) \\
\alpha &= \sqrt{n+1}
\end{aligned}$$

Hieraus ergibt sich

$$b^\dagger \psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}$$

Analoges Vorgehen bestimmt aus $\alpha\psi_{n-1} = b\psi_n$ den Faktor $\alpha = \sqrt{n}$, so dass

$$b\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}$$

Übungsblatt 5 IK4

Aufgabe 1: Schwarzsche Ungleichung

a) Zu zeigen ist die Schwarzsche Ungleichung für zwei Elemente des Hilbertraums $\mathcal{H}$

$$|\langle \varphi | \psi \rangle| \leq \|\varphi\| \, \|\psi\|$$

Seien also $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Wir zerlegen nun den Vektor $|\psi\rangle$ in eine zu $|\varphi\rangle$ paralelle Komponente durch

$$\frac{|\varphi\rangle \langle \varphi | \psi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} = k \, |\varphi\rangle \qquad k \in \mathbb{C}$$

sowie in eine senkrechte Komponente

$$|\gamma\rangle := \left(|\varphi\rangle - \frac{|\varphi\rangle \langle \varphi | \psi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} \right)$$

Der so konstruierte Vektor $|\gamma\rangle$ steht senkrecht auf $|\varphi\rangle$, da

$$\langle \varphi | \gamma \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle - \frac{\langle \varphi | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} \langle \psi | \varphi \rangle = 0$$

Desweiteren kann das Betragsquadrat des skalaren Faktor $|k|^2$ der paralellen Komponente durch

$$|k|^2 \langle \varphi | \varphi \rangle = \langle k\varphi | k\varphi \rangle = \frac{|\langle \varphi | \psi \rangle|^2}{|\langle \varphi | \varphi \rangle|^2} \langle \varphi | \varphi \rangle \quad \Rightarrow \quad |k|^2 = \frac{|\langle \varphi | \psi \rangle|^2}{\|\varphi\|}$$

bestimmt werden. Da man nun den Vektor $|\psi\rangle$ als summe der Vektoren $k \, |\psi\rangle$ und $|\gamma\rangle$ darstellen kann, gilt für das Normquadrat des Vektors

$$\begin{aligned}
\|\psi\|^2 &= \|c \, |\varphi\rangle + |\gamma\rangle\|^2 = \langle k\varphi + \gamma | k\varphi + \gamma \rangle \\
&= |k|^2 \langle \varphi | \varphi \rangle + \langle \gamma | \gamma \rangle + \underbrace{c^* \langle \varphi | \gamma \rangle + c \langle \gamma | \varphi \rangle}_{=0} \\
&= \frac{|\langle \varphi | \psi \rangle|^2}{\|\varphi\|^2} + \underbrace{\|\gamma\|^2}_{\geq 0} \geq \frac{|\langle \varphi | \psi \rangle|^2}{\|\varphi\|^2}
\end{aligned}$$

Hieraus folgt

$$|\langle \varphi | \psi \rangle|^2 \leq \|\varphi\|^2 \, \|\psi\|^2$$

und nach Radizieren die Schwarzsche Ungleichung.

b) Setzen wir nun die Gleichheit der Schwarzschen Ungleichung vorraus, also

$$|\langle \varphi | \psi \rangle| = \|\varphi\| \, \|\psi\|$$

so folgt mit den gleichen Definitonen wie oben aus der letzten Gleichungsfolge

$$\|\gamma\|^2 = 0 \quad \Leftrightarrow \quad |\gamma\rangle = 0$$

Mit der Definition des Vektors $|\gamma\rangle$ folgt nun

$$|\psi\rangle = \underbrace{\frac{\langle\, \varphi\,|\psi\rangle}{\|\varphi\|^2}}_{\in\mathbb{C}}|\varphi\rangle$$

Die Vektoren $|\psi\rangle$ und $|\varphi\rangle$ unterscheiden sich nur um ein Skalar aus $\mathbb{C}$ und sind demnach linear abhängig.
Setzt man die lineare Abhängigkeit vorraus, gibt es eine Konstante $k \in \mathbb{C}$ so dass $|\psi\rangle = k\,|\varphi\rangle$. Bildet man das Skalarprodukt, so folgt

$$|\langle\, \varphi\,|\psi\rangle| = |\langle\, k\psi\,|\psi\rangle| = |k|\,\|\psi\|^2 = \|k\psi\|\,\|\psi\| = \|\varphi\|\,\|\psi\|$$

Insgesamt gilt demnach

$$|\langle\, \varphi\,|\psi\rangle| = \|\varphi\|\,\|\psi\| \quad \Leftrightarrow \quad |\varphi\rangle\,, |\psi\rangle \;\text{ linear abhängig}$$

Übungsblatt 6 IK4

Aufgabe 1: Orthonormale Eigenfunktionen

a) Für das unendlich tiefe Kastenpotential ergibt sich für die angegebenen Lösungen der Schrödinger Gleichung das Integral über den erlaubten Bereich

$$\begin{aligned} I &:= \int_0^L \psi_n(x)^* \psi_m(x) dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) dx \\ &= 2\int_0^1 \sin(n\pi x)\sin(m\pi x) dx = \int_0^1 \cos((n-m)\pi x) - \cos((n+m)\pi x) dx \end{aligned}$$

Für $n = m$ wird das Argument der ersten Kosinusfunktion Null, so dass gilt

$$I = \int_0^1 1 - \cos(2n\pi x) = 1 - \int \cos(2n\pi x) = 1 + \underbrace{\left[\frac{\sin(2n\pi x)}{2n\pi}\right]_0^1}_{=0} = 1$$

Im Falle von $n \neq m$ ergibt sich für das Integral

$$\begin{aligned} I &= \int_0^1 \cos((n-m)\pi x) - \cos((n+m)\pi x) dx = \left[\frac{\sin((n+m)\pi x)}{(n+m)\pi} - \frac{\sin((n-m)\pi x)}{(n-m)\pi}\right]_0^1 \\ &= \frac{\sin((n+m)\pi)}{(n+m)\pi} - \frac{\sin((n-m)\pi)}{(n-m)\pi} = 0 - 0 = 0 \end{aligned}$$

da die Sinusfunktion für alle ganzzahligen Vielfachen von π verschwindet. Insgesamt gilt demnach

$$\int_0^L \psi_n(x)^* \psi_m(x) dx = \delta_{nm}$$

b) Die angegebenen φ_n sind kein Orthonormalsystem. Beispielsweise liefert die Berechnung mit den Vorgaben des Blattes

$$\begin{aligned} \int dx\, \varphi_2^* \varphi_4 &= N_2 N_4 \int dx\, e^{-x^2} H_2 H_4 = N_2 N_4 \int dx\, e^{-x^2} (x^2 - 1)(x^4 - 6x^2 + 3) \\ &= N_2 N_4 \int dx\, e^{-x^2} (x^6 - 7x^4 + 9x^2 - 3) = N_2 N_4 \left(\frac{15}{8} - \frac{21}{4} + \frac{9}{2} - 3\right)\sqrt{\pi} \\ &= -\frac{15}{8} N_2 N_4 \sqrt{\pi} \neq 0 \end{aligned}$$

Allerdings bilden die normierten Lösungen des normonischen Oszillators

$$\psi_n(\xi) := N_n e^{-\frac{1}{2}(\xi)^2} H_n(\xi) \qquad N_n^2 = \frac{1}{2^n n!} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}, \quad \xi = \alpha x, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

mit den Hermitschen Polinomen

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

eine Orthonormalbasis. Hierzu sei oBdA $n \geq m$, da m und n vertauschbar sind. Dann gilt für das Integral

$$\begin{aligned}
I &:= \int dx\, \psi_n(x)^* \psi_m(x) = \frac{1}{\alpha} \int d\xi\, \psi_n(\xi)^* \psi_m(\xi) = \frac{N_m N_m}{\alpha} \int d\xi\, e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) \\
&= \frac{N_m N_m (-1)^n}{\alpha} \int d\xi\, \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} H_m(\xi) \\
&= \frac{N_m N_m (-1)^{n+m}}{\alpha} \int d\xi\, e^{-\xi^2} \frac{d^{n-m}}{d\xi^{n-m}} \left(\frac{d^m}{d\xi^m} H_m(\xi) \right)
\end{aligned}$$

Nach den Ergebnissen des letzen Aufgabenblattes ist

$$\frac{d^m}{d\xi^m} H_m(\xi) = 2^m m!$$

was impliziert, dass höhere Ableiteungen des Hermitschen Polinoms verschinden.
Für den Fall $n = m$ gilt nun:

$$I = \frac{N_n N_n (-1)^{2n}}{\alpha} \underbrace{\int d\xi\, e^{-\xi^2} 2^n n!}_{=2^n n! \sqrt{\pi}} = \underbrace{\frac{1}{2^n n!} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}_{=N_n^2} \frac{2^n n! \sqrt{\pi}}{\alpha} = 1$$

Im Fall $n > m$ gilt $n - m \geq 1$. Somit gilt für das Integral:

$$I = \frac{N_m N_m (-1)^{n+m}}{\alpha} \int d\xi\, e^{-\xi^2} \underbrace{\frac{d^{n-m}}{d\xi^{n-m}} 2^n n!}_{=0} = \frac{N_m N_m (-1)^{n+m}}{\alpha} \int d\xi 0 = 0$$

Für die so definierten ψ_n gilt demnach

$$\int dx\, \psi_n(x) \psi_m(x) = \delta_{nm}$$

Mit den hermitschen Polinomen zweiter Art

$$\hat{H}_n(x) := (-1)^n e^{\frac{1}{2}x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

ergibt sich eine äqivalente Darstellung durch

$$\psi_n(\xi) = C_n e^{-\frac{1}{4}\xi^2} \hat{H}_n(\xi) \qquad C_n^2 = \frac{1}{n!} \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}, \quad \xi = \alpha x, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

definieren. Dies folgt unmittelbar aus dem Zusammenhang:

$$\hat{H}_n(x) = 2^{-n/2} H_n\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right)$$

Übungsblatt 7 IK4

Aufgabe 1: Elektron im Magnetfeld

a) Aus der Lagrangedichte eines Elektrons mit der Ladung $q = -e_0$ in elektrischen und magnetischen Feldern

$$L = \frac{m}{2}v^2 + e_0\phi - e_0\underline{v} \cdot \underline{A}$$

mit dem skalarem Potential ϕ des elektrischen Felds und dem Vektropotential $\underline{A}$ des magnetischen Feldes führt mit Hilfe der Euler-Lagrange-Gleichung auf die Bewegungsgleichung. Es gilt

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial v}L = \frac{d}{dt}(m\underline{v} - e_0\underline{A}) = m\dot{\underline{v}} - e_0(\underline{v} \cdot \nabla)\underline{A}$$

wobei sich die totale Zeitableitung des zeitlich konstanten Vektorpotentials als

$$\frac{d}{dt}\underline{A}(\underline{r}) = \left(\frac{\partial}{\partial t}\underline{r} \cdot \nabla\right)\underline{A} = (\underline{v} \cdot \nabla)\underline{A}$$

ergibt. Die Ableitung der Lagrangedichte nach der Ortskoordinate liefert nun

$$\frac{\partial}{\partial \underline{r}}L = +e_0\nabla\phi - e_0\nabla(\underline{v} \cdot \underline{A})$$

Die Bewegungsgleichung des Teilchens folgt nun aus der EL-Gleichung

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial v}L &= \frac{\partial}{\partial \underline{r}}L \\
m\dot{\underline{v}} - e_0(\underline{v} \cdot \nabla)\underline{A} &= e_0\nabla\phi - e_0\nabla(\underline{v} \cdot \underline{A}) \\
m\dot{\underline{v}} &= \underbrace{e_0\nabla\phi}_{-e_0\underline{E}}\underbrace{-e_0\nabla(\underline{v} \cdot \underline{A}) + e_0(\underline{v} \cdot \nabla)\underline{A}}_{=-e_0\underline{v}\times(\nabla\times\underline{A})} \\
m\dot{\underline{v}} &= -e_0(\underline{E} + \underline{v} \times \underline{B})
\end{aligned}$$

welche genau der Bewegungsgleichung eines Elektrons im magnetischen und elektrischen Feldes aus der Betrachtung der Larentzkraft entspricht.
Eine Identifizierung der Lagrangedichte als $L = T - V$ ist hier nicht möglich, da es sich bei dem System mit magnetischen Feldern nicht unm ein konservatives System (mit konservativen Potentialen) handelt.

b) Aus der Lagrangedichte kann die Hamiltonfunktion des System hergeleitet werden. Es gilt:

$$H = \underline{p} \cdot \underline{v} - L \qquad \underline{p} = \frac{\partial}{\partial \underline{v}}L$$

Für den generalisierten Impuls $\underline{p}$ gilt:

$$\underline{p} = \frac{\partial}{\partial \underline{v}}L = m\underline{v} - e_0\underline{A} \quad \Rightarrow \quad \underline{v} = \frac{1}{m}(\underline{p} - (-e_0)\underline{A})$$

Hieraus folgt für die Hamiltonfunktion:

$$\begin{aligned}
H &= (m\underline{v} - e_0\underline{A})\underline{v} - L = mv^2 - e_0\underline{A}\cdot\underline{v} - \frac{m}{2}v^2 - e_0\phi + e_0\underline{v}\cdot\underline{A} \\
&= \frac{m}{2}v^2 - e_0\phi = \frac{m}{2}\left(\frac{\underline{p} - (-e_0)\underline{A}}{m}\right)^2 - e_0\phi \\
&= \frac{1}{2m}(\underline{p} - (-e_0)\underline{A})^2 - e_0\phi
\end{aligned}$$

c) Für die Zeitentwicklung des Ortsoperators unter des Hamiltonperators

$$H = \frac{1}{2m}(\underline{p} - e\underline{A})^2$$

gilt nach Heisenbergschen Bewegungsgleichung

$$\frac{d}{dt} < r >= \frac{i}{h}[H, r]$$

Für den Kommutator des Hamiltonoperators mit dem Ortsoperator ergibt sich

$$\begin{aligned}
[H, r] &= \frac{1}{2m}\left([(\underline{p} - e\underline{A})^2, \underline{r}]\right) = \frac{1}{2m}\left([p^2, \underline{r}] - e([\underline{p}\underline{A}, \underline{r}] + [\underline{A}\underline{p}, \underline{r}]) + e^2\underbrace{[A^2, r]}_{=0}\right) \\
&= \frac{1}{2m}\left([p^2, \underline{r}] - e(\underline{p}\underbrace{[\underline{A}, \underline{r}]}_{=0} + \underbrace{[\underline{p}, \underline{r}]}_{-i\hbar}\underline{A} + \underline{A}[\underline{p}, \underline{r}] + \underbrace{[\underline{A}, \underline{r}]}_{=0}\underline{p})\right) \\
&= \frac{1}{2m}\left(\underbrace{\underline{p}[\underline{p}, \underline{r}] + [\underline{p}, \underline{r}]\underline{p}}_{=-2i\hbar\underline{p}} + 2ie\underline{A})\right) = \frac{-i\hbar}{m}(\underline{p} - e\underline{A})
\end{aligned}$$

Wir erhalten demach

$$\frac{d}{dt} < r >= \frac{i}{h}[H, r] = \frac{\underline{p} - e\underline{A}}{m}$$

Der in der Aufgabe definierte Operator $\underline{P}$ ergibt sich nun zu

$$\underline{P} = m\frac{d}{dt} < r >= (\underline{p} - e\underline{A})$$

Die Zeitableitung des Operators eribt sich nun einfach zu

$$\frac{d}{dt}P = [H, P] = \frac{1}{2m}[(\underline{p} - e\underline{A})^2, (\underline{p} - e\underline{A})] = 0$$

Übungsblatt 8 IK4

Aufgabe 2: Drehimpulsoperator

a) Für den Drehimpulsoperator $\underline{L}$ gilt:

$$\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p} \qquad \underline{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla$$

Mit dem Ableitungsoperator ∇ in Kugelkoordinaten ergibt sich daraus

$$\begin{aligned}
\underline{L} &= \frac{\hbar}{i} r \underline{e}_r \times \left(\underline{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \underline{e}_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \underline{e}_\phi \frac{1}{r \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} r \underbrace{(\underline{e}_r \times \underline{e}_r)}_{=0} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hbar}{i} \underbrace{(\underline{e}_r \times \underline{e}_\theta)}_{=\underline{e}_\phi} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hbar}{i} \underbrace{(\underline{e}_r \times \underline{e}_\phi)}_{=-\underline{e}_\theta} \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}
\end{aligned}$$

Für den Drehimpulsoperator gilt demnach

$$\underline{L} = \frac{\hbar}{i}\left(\underline{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \underline{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

Mit den kartesischen Einheitsvektoren in der Kugelkoordinatendarstellung

$$\begin{aligned}
\underline{e}_x &= \sin(\theta)\cos(\phi)\underline{e}_r + \cos(\theta)\cos(\phi)\underline{e}_\theta - \sin(\phi)\underline{e}_\phi \\
\underline{e}_y &= \sin(\theta)\sin(\phi)\underline{e}_r + \cos(\theta)\sin(\phi)\underline{e}_\theta + \cos(\phi)\underline{e}_\phi \\
\underline{e}_z &= \cos(\theta)\underline{e}_r - \sin(\theta)\underline{e}_\theta
\end{aligned}$$

folgt für die z-Komponente des Drehimpulses in Kugelkoordinaten

$$L_z = \underline{e}_z \cdot \underline{L} = \frac{\hbar}{i}\left(\cos(\theta)\underline{e}_r - \sin(\theta)\underline{e}_\theta\right)\left(\underline{e}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \underline{e}_\theta \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi} \right) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

Für den Aufstiegs- bzw. Abstiegsoperator gilt

$$\begin{aligned}
L_\pm &= \underline{e}_x \cdot \underline{L} \pm i \underline{e}_y \cdot \underline{L} \\
&= -\frac{\hbar}{i}\frac{\cos(\theta)\cos(\phi)}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{\hbar}{i}\sin(\phi)\frac{\partial}{\partial \theta} \pm \hbar\left(-\frac{\cos(\theta)\cos(\phi)}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \phi} + \cos(\phi)\frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\
&= \hbar\left(\underbrace{(i\sin(\phi) \pm \cos(\phi))}_{=\pm e^{\pm i\phi}} \frac{\partial}{\partial \theta} + \left(i\frac{\cos(\theta)\cos(\phi)}{\sin(\theta)} \mp \frac{\cos(\theta)\sin(\phi)}{\sin(\theta)} \right)\frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\
&= \hbar\left(\pm e^{\pm i\phi}\frac{\partial}{\partial \theta} + \underbrace{(\cos(\phi) \pm i\sin(\phi))}_{=e^{i\phi}} i\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\
&= \hbar e^{\pm i\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial \theta} + i\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial \phi} \right)
\end{aligned}$$

Das Produkt aus Aufstiegs und Abstiegsoperator ergibt sich nun als

$$
\begin{aligned}
L_+L_- &= \hbar^2 e^{i\phi}(\partial_\theta + i\cot(\theta)\partial_\phi)\left\{e^{-i\phi}(-\partial_\theta + i\cot(\theta)\partial_\phi)\right\} \\
&= \hbar^2 e^{i\phi}\left(e^{-i\phi}\partial_\theta(-\partial_\theta + i\cot(\theta)\partial_\phi) + i\cot(\theta)\partial_\phi(-\partial_\theta + i\cot(\theta)\partial_\phi)\right) \\
&= \hbar^2\left(-\partial_\theta^2 - i(1-\cot(\theta))\partial_\phi + i\cot(\theta)\partial_\phi\partial_\theta)\right) \\
&\quad + \hbar^2 e^{i\phi} i\cot(\theta)\left(-ie^{-i\phi}(\partial_\theta + i\cot(\theta)\partial_\phi) + e^{-i\phi}(-\partial_\phi\partial_\theta + i\cot(\theta)\partial_\phi^2)\right) \\
&= \hbar^2\left(-\partial_\theta^2 - i\partial_\phi - \cot(\theta)\partial_\theta - \cot^2(\theta)\partial_\phi^2\right)
\end{aligned}
$$

Klar ist, dass gilt:

$$\hbar L_z = -i\hbar^2\partial_\phi \qquad L_z = -\hbar^2\partial_\phi^2$$

Nun ergibt sich der quadratische Drehimpulsoperator $\underline{L}^2$ als:

$$
\begin{aligned}
\underline{L}^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = \underbrace{L_x^2 - i[L_x, L_y] + L_y^2}_{=(L_x+iL_y)(L_x-iL_y)} + i\underbrace{[L_x, L_y]}_{=i\hbar L_z} + L_z^2 \\
&= L_+L_- - \hbar L_z + L_z^2 \\
&= -\hbar^2\left\{\partial_\theta^2 + i\partial_\phi + \cot(\theta)\partial_\theta + \cot^2(\theta)\partial_\phi^2 - i\partial\phi + \partial_\phi^2\right\} \\
&= -\hbar^2\left\{\underbrace{\cot(\theta)\partial_\theta + \partial_\theta^2}_{=\sin^{-1}(\theta)(\cos(\theta)\partial_\theta + \sin(\theta)\partial_\theta)} + \underbrace{(1+\cot^2(\theta))}_{=\sin^{-1}(\theta)}\partial_\phi^2\right\} \\
&= -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin(\theta)}\partial_\theta(\sin(\theta)\partial_\theta) + \frac{1}{\sin^2(\theta)}\partial_\phi^2\right\}
\end{aligned}
$$

b) Ist $\psi(r,\theta,\phi)$ eine Eigenfunktion des Drehimpulsoperators zum Quadrat, so folgt dass ψ ebenfalls eine Eigenfunktion des Operators L_z ist. Sind die Eigenwerte für $\underline{L}^2$ bzw. L_z bekannt ($\hbar^2 l(l+1)$ für $\underline{L}^2$ und $\hbar m$ für L_z), so führt ein Separationsansatz $\psi(r,\theta,\phi) = \chi(r)Y_{l,m}(\theta,\phi)$ auf:

$$\underline{L}^2\psi = \underline{L}^2(\chi(r)Y_{l,m}(\theta,\phi)) = \chi(r)\underline{L}^2 Y_{l,m}(\theta,\phi)) = \chi(r)\hbar^2 l(l+1)Y_{l,m}(\theta,\phi) = \hbar^2 l(l+1)\psi$$

Das Eigewertproblem $\underline{L}^2\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi$ ist ein vom Radialteil der Wellenfunktion unabhängiges Problem. Analoges folgt für die Eigenwertgleichung $L_z\psi = \hbar\psi$.
Der radiale Anteil der Wellenfunktion $\chi(r)$ bleibt unbestimmt. Aus Normierbarkeitsgründen muss gefordert werden, dass $\chi(r)$ aus dem Raum der quadratintegrablen Funktion über dem postitven Intervall $[0,\infty)$ ist.
Betrachtet man nun die Eigenwertgleichung für L_z, so ergibt sich aus dem Seperationsansatz

$$Y_{l,m}(\theta,\phi) = Y_{l,m}(\theta,0)e^{im\phi}$$

eingesetzt in die Eigenwertgleichung für L_z

$$L_z Y_{l,m}(\theta,\phi) = Y_{l,m}(\theta,0)\underbrace{L_z e^{im\phi}}_{\hbar m} = \hbar m Y_{l,m}(\theta,0)e^{im\phi}$$

eine Lösung des Eigenwertproblems. Aufgurund der Eindeutigkeit der gefundenen Lösung muss man wegen

$$Y_{l,m}(\theta,\phi+2\pi) \stackrel{!}{=} Y_{l,m}(\theta,\phi)$$

und dem daraus folgenden

$$e^{im\phi}e^{2\pi im} \stackrel{!}{=} e^{im\phi} \quad \Rightarrow \quad e^{2\pi im} \stackrel{!}{=} 1$$

für den Eigenwert m fordern, dass dieser eine ganze Zahl ist ($m \in \mathbb{Z}$), da nur für ganzzahlige Vielfache von $2\pi i$ die Exponentailfunktion den Wert 1 ergibt.

c) Aus dem Ansatz der Funktion

$$Y_{l,m}(\theta, 0) = \sin^m(\theta)U_{l,m}(\cos\theta)$$

folgt für die Funktion $Y_{l,m}(\theta,\phi)$:

$$Y_{l,m}(\theta, 0) = Y_{l,m}(\theta, 0)e^{im\phi} = \sin^m(\theta)U_{l,m}(\cos\theta)e^{im\phi}$$

Aus dem Wissen, dass

$$L_+Y_{l,m} \propto Y_{l,m+1} = \sin^{m+1}(\theta)U_{l,m+1}(\cos\theta)e^{i(m+1)\phi}$$

folgt mit der expliziten Anwendung des Erzeugungsoperators

$$\begin{aligned} L_+Y_{l,m} &= \hbar e^{i\phi}\left\{\partial_\theta + i\cot(\theta)\partial_\phi\right\}\sin^m(\theta)U_{l,m}(\cos\theta)e^{im\phi} \\ &= \hbar e^{i\phi}\left(m\sin^{m-1}(\theta)\cos(\theta)U_{lm}(\cos\theta) - \sin^m(\theta)U'_{lm}(\cos\theta)\sin(\theta)\right)e^{im\phi} \\ &\quad + \hbar e^{i\phi}\left(i\frac{\cos(\theta)}{\sin(\theta)}\sin^m(\theta)U_{lm}(\cos\theta)ime^{im\phi}\right) \\ &= -\hbar e^{i(m+1)\phi}\sin^{m+1}(\theta)U'_{lm}(\cos\theta) \end{aligned}$$

durch vergleich der Ergebnisse der Zusammenhang

$$U_{l,m+1}(\cos(\theta)) \propto U'_{l,m}(\cos(\theta))$$

d) Es ist bekannt, dass für die Eigenwerte m von L_z gilt, dass diese $|m| \leq l$ erfüllen müssen. Wir können deshalb fordern, dass

$$L_-Y_{l,-l} = 0$$

Die explizite Berechung von $L_-Y_{l,-l}$ liefert nun

$$\begin{aligned} L_-Y_{l,-l} &= \hbar e^{-i\phi}\left\{-\partial_\theta + i\cot(\theta)\partial_\phi\right\}\left(\sin^{-l}(\theta)U_{l,-l}e^{-il\phi}\right) \\ &= \hbar e^{-i\phi}\left(l\sin^{-l-1}(\theta)\cos(\theta)U_{l,-l} - \sin^l(\theta)U'_{l,-l}\sin(\theta)\right)e^{-il\phi} \\ &\quad + \hbar e^{-i\phi}\left(i\cot(\theta)\sin^{-l}(\theta)U_{l,-l}(-il)e^{-il\phi}\right) \\ &= \hbar e^{-i(l+1)\phi}\sin^{-l-1}(\theta)\left(\sin^2(\theta)U'_{l,-l} + 2l\cos(\theta)U_{l,-l}\right) \stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

Es ergibt sich für $U_{l,-l}$ die einfache Differentialgleichung

$$(1-\cos^2(\theta))\frac{dU_{l,-l}(\cos\theta)}{d\cos\theta} = -2l\cos(\theta)U_{l,-l}(\cos\theta)$$

die mit der Substitution $\xi = \cos(\theta)$ sich zu

$$\frac{dU_{l,-l}(\xi)}{d\xi} = -2l\frac{\xi}{1-\xi^2}U_{l,-l}(\xi)$$

vereinfacht und durch Separation der Variablen gelöst werden kann. Es ergibt sich die Lösung

$$U_{l,-l}(\xi) = C(1-\xi)^l(1+\xi)^l = C(1-\xi^2)l$$

und durch Rücksubstitution

$$U_{l,-l} = C(1-\cos^2(\theta))^l = C\sin^{2l}(\theta)$$

Die Kugelflächenfunktionen für die gilt $m = -l$ sind nun leicht zu bestimmen. Es gilt

$$Y_{0,0} = C\sin^0(\theta)\sin^{2\cdot 0}(\theta)e^0 = C$$

und für den Fall $l = 1$

$$Y_{1,-1} = C\sin^{-1}(\theta)\sin^2(\theta)e^{-i\phi} = C\sin(\theta)e^{-i\phi}$$

Aus den Ergebissen der Aufgabe (c) folgt nun für

$$U_{1,0} \propto \frac{dU_{1,-1}}{d\cos(\theta)} \propto \frac{d}{d\cos(\theta)}(1-\cos^2(\theta)) \propto -\cos(\theta)$$

und

$$U_{1,1} \propto \frac{dU_{1,0}}{d\cos(\theta)} \propto -1$$

, so dass sich die Kugelflächenfunktionen als

$$Y_{1,0} = -C\cos(\theta)$$

bzw.

$$Y_{1,1} = -C\sin(\theta)e^{i\phi}$$

ergeben. Die Normierungskoeffitienten lassen C müssen nun noch durch Integration über die Einheitskugel bestimmt werden. Es muss gelten

$$\int_{B_1(0)} d^3r Y^*_{l,m}Y_{l,m} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta\, Y^*_{l,m}Y_{l,m}\sin(\theta) = 1$$

Es ergeben sich die Integrale über die Kugelflächenfunktionen zu:

$$\int_{B_1(0)} d^3r Y^*_{0,0}Y_{0,0} = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\pi} d\phi\, \sin(\theta) = |C|^2\, 4\pi$$

sowie

$$\int_{B_1(0)} d^3r Y^*_{1,\pm 1}Y_{1,\pm 1} = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\pi} d\phi\, \sin^3(\theta) = |C|^2\, \frac{8}{3}\pi$$

und

$$\int_{B_1(0)} d^3r Y^*_{1,0}Y_{1,0} = |C|^2 \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\pi} d\phi\, \sin(\theta)\cos(\theta)^2 = |C|^2\, \frac{4}{3}\pi$$

Hiermit bestimmt man die Kugelflächenfunktionen als

$$\begin{aligned}
Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
Y_{1,\pm 1} &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin(\theta)e^{\pm i\phi} \\
Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\theta)
\end{aligned}$$

Übungsblatt 9 IK4

Aufgabe 5: sp^3-Hybridisierung

a) Betrachtet man die Matrix

$$M := \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

so wird schnell klar, dass für M gilt:

$$M = M^\dagger$$

Die Berechung von $M \cdot M$ lieft die Einheitsmatrix. Die Matrix M ist somit unitär. Weiter wird schnell klar, dass gilt

$$(\psi_{hyb,1}, \psi_{hyb,2}, \psi_{hyb,3}, \psi_{hyb,4}) = M \cdot (\psi_{2p_s}, \psi_{2p_x}, \psi_{2p_y}, \psi_{2p_z})^T$$

Da Betrag der Determinatne einer unitäre Matrix betragsmäßig 1 ergibt folgt nun die lineare Unabhägigkeit der ψ_{hyb}. Hieraus folgt die Orthogonalität der ψ_{hyb}.
Eine weitere Eigenschalft unitärere Matrizen ist die Erhaltung der Norm für beliebige Vektoren gilt so

$$\|M \cdot x\| = \|x\|$$

Hieraus folgt nun dass jedes ψ_{hyb} auf eins normiert ist, wenn die Wellenfunktionen der Orbitale normiert waren.

b) Für die Wellenfunktion des s-Orbitals gilt

$$\psi_{2s} = R_{2,0}(r)Y_{0,0} = \frac{2}{\sqrt{4\pi}}\alpha^{3/2}(1-\alpha r)e^{-\alpha r}$$

mit $\alpha = Z/2a_B$. Für die p Orbitale ergeben sich die Wellenfunktionen zu

$$\begin{aligned}
\psi_{2p_x} &= \frac{1}{\sqrt{2}}R_{2,1}(Y_{1,-1} - Y_{1,1}) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}R_{2,1}\sin(\theta)\cos(\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\alpha^{3/2}\alpha x e^{-\alpha r} \\
\psi_{2p_y} &= \frac{2}{\sqrt{4\pi}}\alpha^{3/2}\alpha y e^{-\alpha r} \\
\psi_{2p_z} &= \frac{2}{\sqrt{4\pi}}\alpha^{3/2}\alpha z e^{-\alpha r}
\end{aligned}$$

Wir können nun $\psi_{hyb,1}$ und $\psi_{hyb,2}$ bestimmen.

$$\begin{aligned}
\psi_{hyb,1} &= \frac{1}{2}(\psi_{2s} - \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} - \psi_{2p_z}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\alpha^{3/2}(1 - \alpha r + \alpha(x+y+z))e^{-\alpha r} \\
\psi_{hyb,2} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\alpha^{3/2}(1 - \alpha r + \alpha(x-y-z))e^{-\alpha r}
\end{aligned}$$

Als notwendige Bedingung für das Maximum der Wahscheinlichkeitsdichte gilt nun

$$0 = \nabla\rho = \nabla |\psi|^2 = \pm 2 |\psi| \nabla\psi$$

An Nullstellen der Wahrscheinlichkeitsdichte sind wir nicht interessiert, so dass für das Aufreten eines Maximums gelten muss:

$$\nabla\psi = 0$$

Für den Fall von $\psi_{hyb,3}$ liefert die Berechnung der Nullstelle den Vektor

$$r_{1,max} = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \frac{1}{\alpha} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

für den Fall von $\psi_{hyb,4}$ eienen Vektor

$$r_{2,max} = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \frac{1}{\alpha} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

c) Aus der Definition des Skalarprodukts durch den Winkel γ zwischen zwei Vektoren

$$a \cdot b = \|a\| \, \|b\| \cos(\gamma)$$

kann nun der Winkel zwischen den Ortsvekoren der maximalen Wahrscheinlichkeit berechnet werden. Hierbei gilt

$$\cos(\gamma) = \frac{r_{1,max} \cdot r_{2,max}}{\|r_{1,max}\| \, \|r_{2,max}\|} = -\frac{1}{3}$$

Hieraus ergibt sich der Winkel

$$\gamma = \arccos\left(-\frac{1}{3}\right) \approx 109.47^\circ$$

Übungsblatt 10 IK4

Aufgabe 2: Linearer Stark-Effekt

a) Der Störhamiltonian ergibt sich aus der potentiellen Energie der Ladung $-e$ im elektrischen Feld. Das Potential des Feldes ergibt sich als

$$\phi(\underline{r}) = -E_0 z$$

Für die potentielle Energie eines Elektrons im äußeren Feld gilt:

$$V(\underline{r}) = -e\phi(\underline{r}) = eE_0 z$$

Der Hamiltonian des gestörten Systems ergibt sich nun als

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m} + \frac{e^2}{r}}_{=H_0} + \underbrace{eE_0 z}_{=H_1}$$

b) Der Störoperator vertauscht mit der z-Komponente des Drehimpulses. Es ist

$$\begin{aligned} [L_z, H_1] &= eE_0 i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial\phi}(r\cos\theta) - r\cos\theta\frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\ &= eE_0 i\hbar r\cos\theta\frac{\partial}{\partial\phi}(1-1) = 0 \end{aligned}$$

c) Aus $[L_z, H_1] = 0$ folgt nun mit der Rechnung

$$0 = \langle\, nlm\,|[L_z, H_1]|\, n'l'm'\,\rangle = (m - m')\langle\, nlm\,|H_1|\, n'l'm'\,\rangle$$

dass nur für $m = m'$ das Skalarprodukt ungleich null werden kann. Weiter sieht man schnell, dass

$$\cos(\theta)Y_{0,0} = \frac{Y_{1,0}}{\sqrt{3}}$$

Für das Wasserstoff im Zustand $n = 1$ eregeben sich nun für eine Störung mit dem Elektrischen Feld eine Störenergie von

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= \langle\, 100\,|H_1|\, 100\,\rangle = \int d^3r R_{10}^* Y_{00}^* H_1 R_{10} Y_{00} \\ &= \int dr R_{10}^* r^3 R_{10} \underbrace{\int d\theta \int d\phi Y_{00}^* \cos\theta Y_{00} \sin\theta}_{=\langle Y_{00} | Y_{10}/\sqrt{3}\rangle = 0} = 0 \end{aligned}$$

d) Analog zu oben kann nun gezeigt werden, dass

$$\langle\, 200\,|H_1|\, 200\,\rangle = 0$$

Weiter gilt, dass

$$\langle\, 210\,|H_1|\, 210\,\rangle = eE_0 \int drR_{21}^* r^3 R_{21} \int d\phi \underbrace{\int d\theta Y_{10}^* \cos\theta Y_{10} \sin\theta}_{\propto\int d\theta \cos^3\theta \sin\theta = 0} = 0$$

und auch, dass gilt

$$\langle\, 21\pm 1\,|H_1|\, 21\pm 1\,\rangle = eE_0 \int drR_{21}^* r^3 R_{21} \int d\phi \underbrace{\int d\theta Y_{1\pm1}^* \cos\theta Y_{1\pm1} \sin\theta}_{\propto\int d\theta \sin^3\theta \cos\theta = 0} = 0$$

Allerdings gilt für

$$\begin{aligned}
\langle\, 200\,|H_1|\, 210\,\rangle &= \langle\, 200\,|H_1|\, 210\,\rangle = eE_0 \int drR_{20}^* r^3 R_{21} \int d\phi \int d\theta Y_{10}^* \underbrace{\cos\theta Y_{00}}_{=Y_{10}/\sqrt{3}} \sin\theta \\
&= \frac{eE_0}{\sqrt{3}} \int drR_{20}^* r^3 R_{21} \underbrace{\int d\phi \int d\theta Y_{10}^* \cos\theta Y_{10} \sin\theta}_{=1} \\
&= \frac{eE_0}{(2a_0)^3 3a_0} \underbrace{\int dr 2\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) r^4 e^{-\frac{r}{a}}}_{-36a_0^5} = -3eE_0 a_0
\end{aligned}$$

Die Energieverschiebung des gestörten Systems mit $n = 1$ erhalten wir nun aus der Aufsummierung über die Möglichen kombinationen. Mit den wissen, das für das Auftreten eines Skalarproduktes ungleich null die Bedinfgung $m = m'$ gelten muss und den gerechneten Skalarprodukten, folgt nun

$$E_{2lm=0}^{(1)} = \pm 3eE_0 a_0$$

Übungsblatt 11 IK4

Aufgabe 5: Paschen-Back Effekt
Man betrachtet das durch ein äüßeres Magnetfeld gestärte System, für das sich der Hamilton-Operator ergibt als

$$H = H_c + H_z$$

Hierbei entspricht H_c dem Hamilton-Operator des ungestörten Wasserstoffatoms. Im magnetischen Feld $\underline{B} = B\underline{e}_z$ ergibt sich der Zeemanhamiltonian aus den magnetischen Momenten des Bahndrehimpulses und der Elektronenspins

$$H_z = -\underline{\mu}_l \cdot \underline{B} - \underline{\mu}_s \cdot \underline{B} = \frac{e}{2m_e}(\underline{l} + g_s\underline{s}) \cdot \underline{e}_z B = \frac{e}{2m_e}(l_z + g_s s_z)B$$

Die Eigenzustände des ungestörten Hamiltoneans $|nlm_l sm_s\rangle$ diagonalisieren, da $[H_c + H_z] = 0$, auch den Störhamiltonian H_z. Man erhält nun als Energieverschiebung erster Ordnung

$$E_z^{(1)} =< H_z >= \frac{e}{2m_e} \langle \, nlm_l sm_s \, |(\, l_z + g_s s_z)| nlm_l sm_s \, \rangle \, B = \underbrace{\frac{e\hbar}{2m_e}}_{\mu_B}(m_l + g_s m_s)B$$

Da sich der Spin eines elektrons bei optischen Übergängen nicht ändert ergibt sich für die Energie eines Übergangs

$$\Delta E = \Delta E^{(0)} + \mu_B \Delta m_l B$$

Wie es sich auch für den normalen Zeeman-Effekt ergibt. Berücksichtigt man nun die Spin-Bahn-Kopplung durch den Hamilton-Operator

$$H_{SB} = \frac{\mu_0 Z e^2}{4\pi m_e^2}\frac{\underline{s} \cdot \underline{l}}{r^3}$$

Die Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung liefert den Energiebeitrag

$$E_{SB}^{(1)} =< H_{SB} >= -\frac{(Z\alpha)^2}{n} E_n \frac{m_l m_s}{l(l+1/2)(l+1)}$$