Übungszettel 13 - So Long, and Thanks for All the Fish (Abgabe: Vorlesung 30.01.2018 *oder* 31.01.2018 bis 11:15 im Fach)

Aufgabe 1 - Matrixelemente beim Wasserstoffatom (2*28 = 56 Punkte)

Wir betrachten die Eigenzustände des Wasserstoffatoms $|nlm\rangle$ mit der Hauptquantenzahl $n \in \mathbb{N}\setminus\{0\}$, der Bahndrehimpulsquantenzahl $l \in \mathbb{N}_0,\ l < n$ und der magnetischen Quantenzahl $m \in \mathbb{Z},\ |m| \leq l$.

(a) Zeige, dass $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{|nlm\rangle} = \frac{1}{a_0 n^2}$ mit dem Bohrradius a_0.
Hinweis: Der quantenmechanische Virialsatz lautet $\langle \hat{T} \rangle_{|\psi\rangle} = \frac{1}{2}\langle \vec{r} \cdot \vec{\nabla}\hat{V} \rangle_{|\psi\rangle}$ für stationäre Zustände $|\psi\rangle$. Hierbei ist $\hat{T}$ die kinetische Energie und $\hat{V}$ die potentielle Energie. Außerdem gilt natürlich $\langle \hat{H} \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \hat{T} \rangle_{|\psi\rangle} + \langle \hat{V} \rangle_{|\psi\rangle}$.

(b) Zeige die Relation $(l + l' + 2)(l + l')(l - l' + 1)(l - l' - 1)\langle n'l'm'|\hat{z}|nlm\rangle = 0$.
Hinweis: Benutze die Operatoridentität $\hat{L}^4\hat{z} - 2\hat{L}^2\hat{z}\hat{L}^2 + \hat{z}\hat{L}^4 - 2\hbar^2\left(\hat{L}^2\hat{z} + \hat{z}\hat{L}^2\right) = 0$. Die zu zeigende Relation lässt sich zu dem Ausdruck $\left((l + l')^2 + 2(l + l')\right)\left((l - l')^2 - 1\right)\langle n'l'm'|\hat{z}|nlm\rangle = 0$ umformen. Dann kann man beim Ausklammern die dritte binomische Formel benutzen.

(c) Zeige, unter Benutzung des Ergebnisses von Teilaufgabe (b), dass folgende Relation gilt,

$$\langle n'l'm'|\hat{z}|nlm\rangle = 0, \qquad \text{falls } m \neq m' \text{ oder } l \neq l' \pm 1.$$

Diskutiere explizit den Fall $l = l' = 0$ und begründe, dass auch in diesem Fall das Matrixelement verschwindet!

(d) Wir definieren die Operatoren $\hat{\xi}_\pm = \hat{x} \pm i\hat{y}$. Zeige, dass $\left[\hat{L}_z, \hat{\xi}_\pm\right]_- = \pm\hbar\hat{\xi}_\pm$ und schlussfolgere die Relation,

$$\langle n'l'm'|\left[\hat{L}_z, \hat{\xi}_\pm\right]_- \mp \hbar\hat{\xi}_\pm|nlm\rangle = \hbar(m - m' \pm 1)\langle n'l'm'|\hat{\xi}_\pm|nlm\rangle = 0.$$

(e) Eine leichte Modifikation der Argumentation in den Teilaufgaben (b) und (c) erlaubt die Schlussfolgerung, dass $\langle n'l'm'|\hat{x}|nlm\rangle = 0$ und $\langle n'l'm'|\hat{y}|nlm\rangle = 0$ falls $l \neq l' \pm 1$. Zeige, unter Benutzung des Ergebnisses von Teilaufgabe (d), dass somit $\forall \lambda_x, \lambda_y \in \mathbb{C}$ folgende Relation gilt,

$$\langle n'l'm'|\lambda_x\hat{x} + \lambda_y\hat{y}|nlm\rangle = 0, \qquad \text{falls } m \neq m' \pm 1 \text{ oder } l \neq l' \pm 1.$$

Aufgabe 2 - Singuletts und Tripletts (2*16 = 32 Punkte)

In Aufgabe 3 auf dem achten Aufgabenzettel hatten wir die Paulimatrizen kennengelernt,

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Wir bezeichnen die kanonische Basis mit $|j = \frac{1}{2}, m_j = \frac{1}{2}\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ bzw. $|j = \frac{1}{2}, m_j = -\frac{1}{2}\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. In der Vorlesung haben wir gesehen, dass die Operatoren $\hat{s}_i = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i$ $(i = x, y, z)$ eine Darstellung der Spin $j = \frac{1}{2}$ Drehimpulsalgebra bilden,

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = \frac{\hbar}{2}\sum_k \epsilon_{ijk}\hat{s}_k, \quad \hat{s}_z\,|jm_j\rangle = \hbar m_j\,|jm_j\rangle, \quad \hat{s}^2\,|jm_j\rangle \equiv \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2\,|jm_j\rangle = \hbar^2 j\,(j+1)\,|jm_j\rangle.$$

(a) Wir betrachten nun zwei Spin-$\frac{1}{2}$ Teilchen mit Operatoren $\hat{s}_i^{(1)}$ und $\hat{s}_i^{(2)}$ auf den zweidimensionalen Einteilchenhilberträumen $\mathcal{H}^{(1)} = \text{span}\{|j^{(1)} = \frac{1}{2}, m_j^{(1)} = \frac{1}{2}\rangle, |j^{(1)} = \frac{1}{2}, m_j^{(1)} = -\frac{1}{2}\rangle\} \equiv \text{span}\{|jm_j\rangle_1\}$ und $\mathcal{H}^{(2)}$ analog mit $j^{(2)}$ bzw. $m_j^{(2)}$. Der vierdimensionale Zweiteilchenhilbertraum $\mathcal{H}$ ist durch ein sogenanntes Tensorprodukt dieser beiden Einteilchenhilberträume gegeben, $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$. Er wird folgendermaßen aufgespannt,

$$\text{span}\{\mathcal{H}\} = \text{span}\left\{|j^{(1)} = \frac{1}{2}, m_j^{(1)} = \pm\frac{1}{2}\rangle \otimes |j^{(2)} = \frac{1}{2}, m_j^{(2)} = \pm\frac{1}{2}\rangle\right\} \equiv \text{span}\left\{|jm_j\rangle_1\,|jm_j\rangle_2\right\}.$$

Zeige, dass die Produktzustände $|jm_j\rangle_1\,|jm_j\rangle_2$ Eigenzustände des Gesamtspinoperators in z-Richtung, $\hat{S}_z = \hat{s}_z^{(1)} \otimes \mathbb{1}_2^{(2)} + \mathbb{1}_2^{(1)} \otimes \hat{s}_z^{(2)}$ ($\mathbb{1}_2$ ist die zweidimensionale Identität), sind und bestimme die dazugehörigen Eigenwerte.
Hinweis: Die Tensorproduktbasis des Zweiteilchenhilbertraums $\mathcal{H}$ ist gegeben durch,

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Das Tensorprodukt $\hat{A}\otimes\hat{B}$ einer $n\times n$ Matrix $\hat{A}$ mit Einträgen a_{ij} und einer $m\times m$ Matrix $\hat{B}$ mit Einträgen b_{kl} hat die Einträge $\left(\hat{A}\otimes\hat{B}\right)_{pq}=a_{ij}b_{kl}$, wobei $p=n(i-1)+k$ und $q=m(j-1)+l$. Im zweidimensionalen Fall, also $\hat{A}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}\end{pmatrix}$ und $\hat{B}=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22}\end{pmatrix}$, führt das auf den Ausdruck

$$\hat{A}\otimes\hat{B}=\begin{pmatrix} a_{11}\hat{B} & a_{12}\hat{B} \\ a_{21}\hat{B} & a_{22}\hat{B}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} \\ a_{21}b_{22} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22}\end{pmatrix},\ \text{z.B. (nachrechnen!)}\ \hat{S}_z=\begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\hbar\end{pmatrix}.$$

(b) Zeige, dass manche Produktzustände aus Teilaufgabe (a) *keine* Eigenzustände vom totalen Gesamtspinoperator $\hat{S}^2=\hat{S}_x^2+\hat{S}_y^2+\hat{S}_z^2$ sind, wobei $\hat{S}_x$ und $\hat{S}_y$ analog zu $\hat{S}_z$ definiert sind.

(c) Zeige, dass die Hilbertraumvektoren

$$\begin{aligned}
|J=0,m_J=0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle\right] &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_2-\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_2\right],\\
|J=1,m_J=-1\rangle \equiv |\downarrow\downarrow\rangle &= \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_2,\\
|J=1,m_J=0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle\right] &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_2+\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_2\right],\\
|J=1,m_J=1\rangle \equiv |\uparrow\uparrow\rangle &= \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_1\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_2
\end{aligned}$$

gemeinsame Eigenzustände zu den Operatoren $\hat{S}^2$ und $\hat{S}_z$ sind. Berechne die dazu gehörigen Eigenwerte.

(d) Aus dem Ergebnis zu Teilaufgabe (c) folgt, dass die Zustände $|J=1,m_J=\pm1,0\rangle$ einen dreidimensionalen Eigenraum zum dreifach entarteten Eigenwert von $\hat{S}^2$ aufspannen - man nennt sie daher *Triplett-Zustände*. Analog gehört der Zustand $|J=0,m_J=0\rangle$ zu einem eindimensionalen Eigenraum zum nicht entarteten Eigenwert von $\hat{S}^2$ - man nennt ihn den *Singulett-Zustand*. Zeige, dass $\hat{S}^2$ und $\hat{S}_z$ auf dem Raum der Triplettzustände wie Spin-1 Operatoren wirken und auf den Singulettzustand wie ein Spin-0 Operator.
Bemerkung: Wir haben damit das direkte Produkt zweier $J=\frac{1}{2}$ Hilberträume in die direkte Summe eines $J=1$ und eines $J=0$ Hilbertraum zerlegt. Mit anderen Worten, wir haben gezeigt, dass $\mathcal{H}_{J=\frac{1}{2}}\otimes\mathcal{H}_{J=\frac{1}{2}}\cong\mathcal{H}_{J=1}\oplus\mathcal{H}_{J=0}$. Beachte insbesondere, dass die Dimensionalitäten in der Tat übereinstimmen: $2\cdot2=3+1$.

Aufgabe 3 - DC Stark-Effekt und Auswahlregeln (2*16 = 32 Punkte)

Wir betrachten ein Wasserstoffatom, welches einem elektrisches Feld in der Dipolnäherung ausgesetzt wird. Der entsprechende Welchselwirkungsoperator, $\hat{H}_1$, ist gegeben durch

$$\hat{H}_1(\vec{r})=e\mathcal{E}_0\vec{e}_P\cdot\vec{r},$$

wobei $\mathcal{E}_0$ die elektrische Feldstärke, $\vec{e}_P$ der Polarisationsvektor des elektrischen Feldes, e die Elementarladung und $\vec{r}$ der Ortsvektor ist.

(a) Zeige, dass der Grundzustand des Wasserstoffatoms durch ein linear polarisiertes ($\vec{e}_P=\hat{e}_z$) elektrisches Feld in erster Ordnung Störungstheorie keiner Energieverschiebung unterliegt. Interpretiere dies physikalisch!
Hinweis: Korrekturen erster Ordnung werden durch permanente Dipole hervorgerufen - wie groß ist das Dipolmoment des Wasserstoffatoms im Grundzustand?

(b) Die Energieverschiebung des Grundzustands des Wasserstoffatoms durch ein statisches, linear polarisiertes elektrisches Feld in zweiter Ordnung Störungstheorie über die gebundenen Zustände ist gegeben durch den Ausdruck $\Delta E_b^{(2)}=\sum_{|nlm\rangle\neq|100\rangle}\frac{\left|\langle nlm|\hat{H}_1|100\rangle\right|^2}{E_{100}-E_{nlm}}$. Zeige, dass $\Delta E_b^{(2)}\simeq-1.83a_0^3\mathcal{E}_0^2$ (Bohrradius a_0). Experimentell misst man jedoch eine größere Verschiebung ($\Delta E_{\text{exp}}^{(2)}=-2.25a_0^3\mathcal{E}_0^2$) - wie ist das zu erklären?
Hinweis: Es gilt $|\langle nlm|z|100\rangle|^2=\frac{256}{3}\frac{n^7(n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}}a_0^2\delta_{l1}\delta_{m0}$. Die resultierende Summe über n kann man z.B. mit Mathematica berechnen - es genügt hier aber die ersten beiden Terme für eine grobe Näherung auszuwerten.

(c) In erster Ordnung Störungstheorie gilt nach Fermis goldener Regel, dass die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen Eigenzuständen $|nlm\rangle$ und $|n'l'm'\rangle$ proportional zum Matrixelementquadrat $\left|\langle n'l'm'|\hat{H}_1|nlm\rangle\right|^2$ ist. Wie lauten die erlaubten elektrischen Dipolübergänge beim Wasserstoffatom für linear polarisiertes Licht sowie für rechtszirkular ($\vec{e}_P=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_x+i\hat{e}_y)$) bzw. linkszirkular ($\vec{e}_P=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{e}_x-i\hat{e}_y)$) polarisiertes Licht?