Institut für Theoretische Physik
C. Ewerz

Universität Heidelberg
Wintersemester 2008/09

Übungen zur Quantenmechanik II

1 Helium-Atom

Der Hamiltonoperator des Helium–Atoms ist

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^{(1)} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta^{(2)} - \frac{2e_0^2}{r^{(1)}} - \frac{2e_0^2}{r^{(2)}} + \frac{e_0^2}{|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|}\,, \tag{1}$$

wobei m die Elektronmasse und $-e_0$ die Ladung des Elektrons. Die Indizes in Klammern beziehen sich auf die beiden Elektronen, $r^{(1)} = \left|\vec{x}^{(1)}\right|$, $r^{(2)} = \left|\vec{x}^{(2)}\right|$. Der Hilbertraum dieses Problems wird im Ortsraum durch Zweiteilchen–Wellenfunktionen $\phi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$ aufgespannt. Aufgrund der Wechselwirkung der Elektronen (vgl. den letzten Term in Gl. (1)) kann dieses Problem nicht exakt gelöst werden. Wir wollen deshalb das Ritzsche Variationsverfahren anwenden, um die Grundzustandsenergie abzuschätzen.

Als einfache Testfunktion wollen wir das Produkt zweier Einteilchen–Wellenfunktionen ansetzen, die jeweils Eigenzustände des Coulombproblems beschreiben. Es erscheint physikalisch sinnvoll anzunehmen, daß das Feld des Kerns teilweise durch das jeweils andere Elektron abgeschirmt wird. Wir wollen dies in der Wahl der Testfunktion berücksichtigen, indem wir in den beiden Einteilchenfunktionen die Kernladung als freien Parameter wählen, den wir dann variieren. Wir setzen also an

$$\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = \psi_{100}^{Z_{\text{eff}}}(\vec{x}^{(1)})\psi_{100}^{Z_{\text{eff}}}(\vec{x}^{(2)})\,, \tag{2}$$

worin

$$\psi_{100}^{Z}(\vec{x}) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}}\,\exp\left(\frac{-Zr}{a_0}\right) \tag{3}$$

die normierte Grundzustandswellenfunktion für das Coulombproblem mit der Kernladung Z ist. (Beachten Sie, daß damit $\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$ auf 1 normiert ist.) Finden Sie eine optimale Abschätzung für die Grundzustandsenergie des Heliumatoms, indem Sie Z_{eff} variieren.

Hinweis:

$$\int d^3x^{(1)} d^3x^{(2)} \left|\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})\right|^2 \frac{e_0^2}{|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|} = \frac{5}{8}\frac{Z_{\text{eff}}e_0^2}{a_0} \tag{4}$$

Bemerkung: Der mit dem Ritzschen Variationsverfahren gewonnene Wert für die Grundzustandsenergie liegt um 2.7 eV näher am experimentell gemessenen Wert ($E_0 = -78.8\,\text{eV}$) als der in Störungstheorie 1. Ordnung gewonnene Wert, wenn man die Wechselwirkung der Elektronen als Störung betrachtet.

2 Alkali-Atome

In einem Alkali–Atom wird die Kernladung durch die Elektronen gefüllter Schalen abgeschirmt, so daß das effektive Potential für das Leuchtelektron die Form

$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{e_0^2}{r}\left(1 + (Z-1)\chi(r)\right) \tag{5}$$

hat, wobei χ eine monoton fallende Funktion ist mit $\chi(r) \geq 0$, $\chi(0) = 1$ und $\chi(\infty) = 0$. Ein möglicher Ansatz für diese Abschirmfunktion ist z. B. $\chi(r) = \exp(-r/a_0)$. Im folgenden wollen wir den Spin des Elektrons vernachlässigen.

(a) Geben Sie die Ausdrücke für die Energie des Leuchtelektrons mit der Hauptquantenzahl $n > 1$ in Störungstheorie 1. Ordnung an, indem Sie die Abweichung vom Coulombpotential als Störung betrachten. (Hier ist keine Rechnung erforderlich.)

(b) Zeigen Sie, daß die Störung (d. h. die Energieverschiebung) diagonal in den Quantenzahlen l und m ist.

(c) Argumentieren Sie, daß der Zustand mit $l = 0$ am tiefsten und daß der Zustand mit $l = n - 1$ am höchsten liegt. Betrachten Sie hierzu die Störung in erster Ordnung.

(d) Bestimmen Sie das Verhalten der exakten Lösung am Ursprung.

3 Parität für Teilchen ohne Spin

Der Paritätsoperator $\mathcal{P}$ ist definiert als ein Operator, der in der Ortsdarstellung auf einen Zustand $|\psi\rangle$ im Hilbertraum $\mathcal{H}$ wirkt gemäß

$$\mathcal{P}\psi(\vec{x}) = \psi(-\vec{x})\,. \tag{6}$$

(a) Zeigen Sie die folgenden Eigenschaften des Paritätsoperators:

$$\mathcal{P}^2 = \mathbf{1} \tag{7}$$
$$\mathcal{P}^\dagger = \mathcal{P}\,. \tag{8}$$

Zeigen Sie, daß der Paritätsoperator unitär ist und die Eigenwerte ± 1 hat.

(b) Sei $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)$. Zeigen Sie, daß $[\mathcal{P}, \mathbf{H}] = \left[\mathcal{P}, \vec{\mathbf{L}}\right] = 0$, und schließen Sie, daß es simultane Eigenfunktionen von $\mathbf{H}, \vec{\mathbf{L}}^2, \mathbf{L}_3$ und $\mathcal{P}$ gibt. Zeigen Sie außerdem für $\psi(\vec{x}) = f(r) Y_l^m(\vartheta, \varphi)$

$$\mathcal{P}\psi(\vec{x}) = (-1)^l \psi(\vec{x})\,. \tag{9}$$

Hinweis: Es gilt

$$Y_l^l(\vartheta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\,\sin^l\vartheta\, e^{il\varphi}\,. \tag{10}$$

4 Umlaufzahl und Polarwinkelform

Wir wollen im zweidimensionalen Raum $\mathbb{R}^2$ das Vektorfeld

$$\vec{A}(x,y) = \left(-\frac{y}{x^2+y^2}, \frac{x}{x^2+y^2}\right) \tag{11}$$

betrachten.

(a) Zeigen Sie, daß

$$\frac{\partial A_1}{\partial y} = \frac{\partial A_2}{\partial x} \tag{12}$$

und $\vec{A} = \vec{\nabla} f(x,y)$ mit $f(x,y) = \arctan\left(\frac{y}{x}\right)$.

(b) Man kann zeigen, daß für jede geschlossene Kurve C

$$\int_C \vec{A} \cdot \vec{ds} = 2\pi n\,, \tag{13}$$

wobei $n \in \mathbb{Z}$ die Umlaufzahl des Weges C um den Ursprung bezeichnet. Überprüfen Sie dies an Beispielen (etwa für geeignete Kreiswege).

Bemerkung: Wegen dieses Resultats wird $\theta = \vec{A} \cdot \vec{ds}$ als Polarwinkelform bezeichnet. In der nächsten Aufgabe werden wir sehen, daß diese in der Quantenmechanik eine wichtige Anwendung beim Aharonov–Bohm–Effekt findet.

5 Aharonov-Bohm-Effekt

Elektronen aus einer Quelle bei $\vec{x}_0$ treffen auf eine Doppelspaltanordnung, hinter der ein Schirm aufgestellt ist. Zwischen den beiden Spalten sei eine (unendlich lange) Spule parallel zu den Spalten angebracht, die ein Magnetfeld erzeugt, das auf das Innere der Spule beschränkt ist. Die Spule sei derart abgeschirmt, daß die Elektronen nicht in das Magnetfeld eindringen können.
Der Hamiltonoperator für die Bewegung eines Elektrons im konstanten Magnetfeld $\vec{B}$ ist

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\left(\vec{\mathbf{P}} + \frac{e_0}{c}\vec{A}\right)^2 , \tag{14}$$

wobei $-e_0$ die Elektronladung und $\vec{A}$ ein Vektorpotential für $\vec{B}$ ist, d, h. $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$. Zeigen Sie zunächst, daß das Vektorpotential ($A \in \mathbb{R}$)

$$\vec{A}(\vec{x}) = \left(-\frac{Ax_2}{x_1^2+x_2^2}, \frac{Ax_1}{x_1^2+x_2^2}, 0\right) \tag{15}$$

das Magnetfeld obiger Versuchsanordnung beschreibt. Zeigen Sie weiter, daß

$$\psi_B(\vec{x}) = \exp\left(-\frac{ie_0}{\hbar c}\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}} \vec{A} \cdot \vec{ds}\right)\psi_0(\vec{x}) \tag{16}$$

eine Lösung der Schrödingergleichung mit Magnetfeld ist, wenn $\psi_0(\vec{x})$ eine Lösung der Schrödingergleichung ohne Feld ist. Zeigen Sie mit Hilfe der Ergebnisse der Aufgabe 4, daß sich das Interferenzmuster auf dem Schirm ändert, wenn das Magnetfeld in der Spule ein- bzw. ausgeschaltet wird.

6 Parität für Teilchen mit Spin 1/2

Wir wollen den Paritätsoperator für Teilchen mit Spin 1/2 betrachten. Zustände im Hilbertraum $\mathcal{H}_{1/2}$ für diese Teilchen sind Spinoren, d. h. sie haben die Form

$$\chi(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \chi_1(\vec{x}) \\ \chi_2(\vec{x}) \end{pmatrix}, \tag{17}$$

worin χ_1 und χ_2 quadratintegrable Funktionen sind. Der Paritätsoperator $\mathcal{P}$ ist auf $\mathcal{H}_{1/2}$ definiert durch

$$(\mathcal{P}\chi)(\vec{x}) = \chi(-\vec{x})\,. \tag{18}$$

(a) Zeigen Sie, daß der Paritätsoperator unitär ist und daß

$$\mathcal{P}^2 = \mathbf{1} \tag{19}$$
$$\mathcal{P}^\dagger = \mathcal{P}\,. \tag{20}$$

Sei nun $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r) + W(r)\,\vec{\mathbf{L}}\cdot\vec{\mathbf{S}}$, und $\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}$.

(b) Zeigen Sie, daß $[\mathcal{P}, \mathbf{H}] = \left[\mathcal{P}, \vec{\mathbf{J}}\right] = 0$, und schließen Sie, daß es simultane Eigenfunktionen von $\mathbf{H}, \vec{\mathbf{L}}^2, \vec{\mathbf{S}}^2, \vec{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}_3$ und $\mathcal{P}$ gibt. Ist $\psi(\vec{x}) = f(r)\chi^{jl}_m(\vartheta,\varphi)$ eine solche Eigenfunktion, so gilt

$$\mathcal{P}\psi(\vec{x}) = (-1)^l\psi(\vec{x})\,. \tag{21}$$

(c) Durch die Angabe der Eigenwerte von $\vec{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}_3$ und $\mathcal{P}$ sind die Zustände $\chi^{jl}_m(\vartheta,\varphi)$ eindeutig klassifiziert. Zeigen Sie dies an Beispielen, z. B. anhand der Bedeutung der spektroskopischen Notation $J^P = \frac{3}{2}^+$ oder $J^P = \frac{7}{2}^-$.

(d) Zeigen Sie, daß für Teilchen ohne Spin (vgl. Aufg. 3) gilt: Wenn $V(\vec{x})$ drehinvariant ist, so ist $V(\vec{x})$ paritätsinvariant.

Für Teilchen mit Spin trifft dies i. a. nicht zu. Zeigen Sie dazu, daß die Operatoren $g(r)\,\vec{\mathbf{x}}\cdot\vec{\mathbf{S}}$ oder $g(r)\,\vec{\mathbf{p}}\cdot\vec{\mathbf{S}}$ zwar drehinvariant, aber nicht paritätsinvariant sind.

7 Streuamplitude in Bornscher Näherung

In Bornscher Näherung ist die Streuamplitude $f(\theta,\varphi)$ für die Streuung am Potential $V(\vec{x})$ gegeben durch

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\,V(\vec{q})\,, \tag{22}$$

worin $V(\vec{q})$ die Fouriertransformierte des Potentials $V(\vec{x})$ ist,

$$V(\vec{q}) = \int d^3x\,V(\vec{x})\,e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}\,. \tag{23}$$

Dabei ist $\vec{q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$ der Streuwellenvektor, d. h. die Differenz zwischen den Wellenvektoren des auslaufenden und des einlaufenden Teilchens.

(a) Zeigen Sie, daß für kugelsymmetrische Potentiale, also für $V(\vec{x}\,) = V(r)$ mit $q = |\vec{q}\,|$ gilt

$$V(\vec{q}\,) = V(q) = \frac{4\pi}{q}\int_0^\infty dr\,V(r)\,r\sin(qr)\,. \tag{24}$$

(b) Berechnen Sie $V(q)$ für
(i) das Yukawa-Potential

$$V(r) = A\,\frac{e^{-r/\mu}}{r}\,, \tag{25}$$

(ii) das Gauß-Potential

$$V(r) = A\exp\left(-\frac{r^2}{2a^2}\right)\,, \tag{26}$$

(iii) für das Kastenpotential

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } r < a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{27}$$

8 Streuung am Coulomb-Potential

Berechnen Sie den differentiellen Wirkungsquerschnitt für die Streuung am Coulomb-Potential in Bornscher Näherung gemäß

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta,\varphi)|^2\,. \tag{28}$$

Benutzen Sie dazu das Ergebnis von Aufg. 7 (b) (i),

$$V(q) = 4\pi A\,\frac{1}{q^2+\frac{1}{\mu^2}}\,, \tag{29}$$

und nehmen Sie einen geeigneten Grenzwert des Yukawa-Potentials. Verwenden Sie außerdem $|\vec{k}_f| = |\vec{k}_i| = k$ und $q = 2k\sin(\theta/2)$ (warum?). Woher kennen Sie das Resultat bereits?

9 Freier Propagator im Impulsraum

Aus dem Propagator im Ortsraum, $K(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0)$, kann man durch Fouriertransformation den Propagator im Impulsraum gewinnen,

$$K(\vec{p}_1, t_1; \vec{p}_0, t_0) = \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\vec{p}_1\cdot\vec{x}_1\right) K(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\vec{p}_0\cdot\vec{x}_0\right) d^3x_0\, d^3x_1\,, \tag{30}$$

der die Wahrscheinlichkeitsamplitude für einen Übergang eines Teilchens vom Impuls $\vec{p}_0$ zur Zeit t_0 zum Impuls $\vec{p}_1$ zur Zeit t_1 beschreibt.

(a) Zeigen Sie, daß die Impulsraumdarstellung des freien Propagators

$$K_0(\vec{x}_1, t_1; \vec{x}_0, t_0) = \theta(t_1 - t_0)\left[\frac{m}{2\pi i\hbar(t_1 - t_0)}\right]^{\frac{3}{2}} \exp\left[\frac{im(\vec{x}_1 - \vec{x}_0)^2}{2\hbar(t_1 - t_0)}\right] \tag{31}$$

gegeben ist durch

$$K_0(\vec{p}_1, t_1; \vec{p}_0, t_0) = (2\pi\hbar)^3\,\theta(t_1 - t_0)\,\delta(\vec{p}_0 - \vec{p}_1)\,\exp\left[\frac{-i\vec{p}_0^{\,2}(t_1 - t_0)}{2\hbar m}\right]. \tag{32}$$

Hinweis: Es ist günstig, eine Transformation zu neuen Koordinaten $\vec{x} = \vec{x}_0 - \vec{x}_1$, $\vec{X} = \vec{x}_0 + \vec{x}_1$, und $\vec{p} = \vec{p}_0 - \vec{p}_1$, $\vec{P} = \vec{p}_0 + \vec{p}_1$ durchzuführen.

Durch eine weitere Fouriertransformation bzgl. t erhält man den Propagator in Abhängigkeit von der Energie E,

$$K(\vec{p}_1, E_1; \vec{p}_0, E_0) = \int \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,E_1 t_1\right) K(\vec{p}_1, t_1; \vec{p}_0, t_0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,E_0 t_0\right) dt_0\, dt_1\,, \tag{33}$$

der die Wahrscheinlichkeitsamplitude für einen Übergang von einem Impuls $\vec{p}_0$ und einer Energie E_0 zu einem Impuls $\vec{p}_1$ und einer Energie E_1 beschreibt.

(b) Berechnen Sie den freien Propagator in dieser Darstellung, d. h. $K_0(\vec{p}_1, E_1; \vec{p}_0, E_0)$.

Hinweis: Hierbei tritt ein Integral der Form $\int_0^\infty e^{i\omega\tau} d\tau$ auf, das für reelle ω nicht konvergiert. Ersetzen Sie hier $\omega \to \omega + i\epsilon$ mit $\epsilon > 0$, um Konvergenz zu erzeugen, und belassen Sie das ϵ im Ergebnis.

10 Niederenergiestreuung an einer harten Kugel

Wir betrachten die Streuung von Teilchen am Potential einer harten Kugel,

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{für } r < R_0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{34}$$

bei niedriger Energie, $kR_0 \ll 1$, so daß nur die s-Welle zur Streuung beiträgt. Setzen Sie die Streulösung in der Form $\psi(\vec{x}) = r^{-1}u_{k,l}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ an und geben Sie die radiale Gleichung für die Funktion $u_{k,0}(r)$ an. Finden Sie mit Hilfe der Randbedingung bei $r = R_0$ die Lösung dieser Gleichung und lesen Sie daran die Streuphase δ_0 ab. Bestimmen Sie den totalen Wirkungsquerschnitt und vergleichen Sie ihn mit dem Resultat, das Sie in der klassischen Mechanik für diesen Prozeß erwarten würden.

11 Translationsoperator

Der Translationsoperator ist für $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$ auf dem Hilbertraum $\mathcal{H}$ definiert als

$$\mathbf{T}_{\vec{a}} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\vec{a}\cdot\vec{\mathbf{P}}\right), \tag{35}$$

wobei $\mathbf{P}$ der Impulsoperator ist.

(a) Zeigen Sie, daß $\mathbf{T}_{\vec{a}}$ unitär ist und daß

$$\mathbf{T}_{\vec{a}} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,a_1\mathbf{P}_1\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,a_2\mathbf{P}_2\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,a_3\mathbf{P}_3\right). \tag{36}$$

Zeigen Sie außerdem, daß $\mathbf{T}_{\vec{a}}$ die Darstellungseigenschaft besitzt, d. h. daß für $\vec{a},\vec{b} \in \mathbb{R}^3$

$$\mathbf{T}_{\vec{a}}\mathbf{T}_{\vec{b}} = \mathbf{T}_{\vec{a}+\vec{b}}\,. \tag{37}$$

(b) Betrachten Sie $\psi \in \mathcal{H}$ in Ortsraumdarstellung, wobei $\psi(\vec{x})$ unendlich oft differenzierbar sei. Zeigen Sie daß

$$\mathbf{T}_{\vec{a}}\,\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}-\vec{a})\,. \tag{38}$$

12 Darstellung der Drehgruppe für Teilchen ohne Spin

Wir betrachten die Gruppe $SO(3)$ der Drehungen in drei Dimensionen. Für eine Drehung $R \in SO(3)$ gilt $\det(R) = 1$ und $R^T R = \mathbf{1}$. Bezeichne $R_{\vec{\omega}}$ mit $\vec{\omega} \in \mathbb{R}^3$ die Matrix einer Drehung mit dem Drehwinkel $|\vec{\omega}|$ und der Drehachse $\vec{\omega}/|\vec{\omega}|$.

(a) Bestimmen Sie für einen gegebenen Vektor $\vec{a}$ eine Matrix $I(\vec{a})$ so, daß für jeden Vektor $\vec{b} \in \mathbb{R}^3$ gilt

$$I(\vec{a})\,\vec{b} = \vec{a}\times\vec{b}\,. \tag{39}$$

Wählen Sie dann $\vec{a}$ in z-Richtung, $\vec{a} = \varphi\,\vec{e}_z$, und geben Sie $I(\vec{a})$ an. Zeigen Sie für diesen Fall, daß $\exp[I(\vec{a})]$ die Matrix $R_{\vec{a}}$ für eine Drehung um die z-Achse mit dem Drehwinkel φ ist.

Eine unitäre Darstellung D der Drehgruppe auf dem Hilbertraum $\mathcal{H}$ für Teilchen ohne Spin kann man im Ortsraum definieren, indem man für $R_{\vec{\omega}} \in SO(3)$ und Zustände $|\psi\rangle$ setzt

$$D(R_{\vec{\omega}})\psi(\vec{x}) = \psi\left(R_{\vec{\omega}}^{-1}\vec{x}\right) . \tag{40}$$

(b) Zeigen Sie die sog. Darstellungseigenschaft

$$D(R_{\vec{\omega}_1} \cdot R_{\vec{\omega}_2}) = D(R_{\vec{\omega}_1})D(R_{\vec{\omega}_2}) . \tag{41}$$

(c) Zeigen Sie, daß die Abbildung $D(R_{\vec{\omega}})$ unitär ist.

(d) Man kann allgemein zeigen

$$D(R_{\vec{\omega}}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\omega}\cdot\vec{\mathbf{L}}\right) , \tag{42}$$

d. h. die Komponenten des Drehimpulsoperators $\vec{\mathbf{L}}$ sind gerade die Generatoren der Drehungen auf den quantenmechanischen Zuständen. Überprüfen Sie diesen Zusammenhang für den Fall einer Drehung um die x_3-Achse.
Hinweis: Wählen Sie geeignete Koordinaten und ein geeignetes Funktionensystem.

13 Boost eines Teilchens

Wir betrachten ein Teilchen ohne Spin mit dem Hamiltonoperator $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$.

(a) Zeigen Sie: Ist $\psi(\vec{x},t)$ eine Lösung der Schrödingergleichung, so ist die als

$$\psi'(\vec{x},t) = \exp\left[\frac{im}{\hbar}\left(\vec{v}\cdot\vec{x} - \frac{1}{2}v^2 t\right)\right]\psi(\vec{x}-\vec{v}t,t) \tag{43}$$

definierte 'geboostete' Wellenfunktion ebenfalls eine Lösung.

(b) Zeigen Sie, daß für die Anwendung desselben Boosts auf die Funktion

$$\psi_{\vec{p}} = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\vec{x} - \frac{t\vec{p}^{\,2}}{2m}\right)\right] \tag{44}$$

gilt $\psi'_{\vec{p}} = \psi_{\vec{p}+\vec{v}m}$. Welche Bedeutung hat die Funktion $\psi_{\vec{p}}$?

14 Zeitumkehroperator für Teilchen ohne Spin

Wir betrachten Teilchen ohne Spin mit dem Hamiltonoperator $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})$. Der Zeitumkehroperator $\mathcal{T}$ sei definiert durch

$$\mathcal{T}\psi(\vec{x},t) = \psi^*(\vec{x},-t)\,. \tag{45}$$

(a) Zeigen Sie, daß der Zeitumkehroperator $\mathcal{T} : \psi \to \psi'$ antiunitär ist, d. h.

  (i) Er ist antilinear.

  (ii) Es gilt für ein hermitesches Skalarprodukt $\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\phi\rangle$.

(b) Zeigen Sie: Falls $\psi(\vec{x},t)$ eine Lösung der Schrödingergleichung ist, so ist auch $\psi'(\vec{x},t) = \mathcal{T}\psi$ eine Lösung.

15 Zeitumkehroperator für Teilchen mit Spin 1/2

Wir betrachten Spin-1/2-Teilchen. Der Hamiltonoperator sei (mit $\vec{\mathbf{S}} = \vec{\sigma}/2$) gegeben durch $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x}) + W(\vec{x})\,\vec{\mathbf{L}}\cdot\vec{\mathbf{S}}$. Der Zeitumkehroperator $\mathcal{T}$ ist für Spinoren ψ definiert durch

$$\mathcal{T}\psi(\vec{x},t) = -i\sigma_2\psi^*(\vec{x},-t)\,. \tag{46}$$

Zeigen Sie:

(a) $\sigma_k^* = -\sigma_2\sigma_k\sigma_2$ in der Standarddarstellung der Pauli-Matrizen.

(b) Der Zeitumkehroperator $\mathcal{T} : \psi \to \psi'$ ist antiunitär.

(c) Bestimmen Sie $\mathcal{T}^2$.

(d) Es gilt

$$\begin{aligned}
\mathcal{T}\,\vec{\mathbf{P}} &= -\vec{\mathbf{P}}\,\mathcal{T} && (47)\\
\mathcal{T}\,\vec{\mathbf{X}} &= \vec{\mathbf{X}}\,\mathcal{T} && (48)\\
\mathcal{T}\,\vec{\mathbf{L}} &= -\vec{\mathbf{L}}\,\mathcal{T} && (49)\\
\mathcal{T}\,\vec{\mathbf{S}} &= -\vec{\mathbf{S}}\,\mathcal{T} && (50)\\
[H,\mathcal{T}] &= 0\,. && (51)
\end{aligned}$$

Hinweis: Wenden Sie diese Produkte von Operatoren auf einen Spinor ψ an.

(e) Falls $\psi(\vec{x},t)$ eine Lösung der Schrödingergleichung ist, so ist auch $\psi'(\vec{x},t) = \mathcal{T}\psi(\vec{x},t)$ eine Lösung.

(f) Falls ψ_E Lösung der stationären Schrödingergleichung zum Eigenwert E ist, so ist $\psi'_E = \mathcal{T}\psi_E$ ebenfalls Lösung mit dem selben Eigenwert. (*Hinweis:* Benutzen Sie z. B. daß $[H,\mathcal{T}] = 0$.) Es gilt $\langle\psi_E|\psi'_E\rangle = 0$, d. h. die beiden Zustände sind orthogonal. Dies bezeichnet man als Kramersche Entartung.

16 Darstellung der Drehgruppe für Teilchen mit Spin 1/2

Für allgemeine Drehimpulsoperatoren $\vec{\mathbf{j}}$ mit Komponenten $\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2, \mathbf{j}_3$ sollen die Beziehungen

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_3 |j\,m\rangle &= m|j\,m\rangle & (52)\\ \vec{\mathbf{j}}^{\,2}|j\,m\rangle &= j(j+1)|j\,m\rangle & (53)\\ \mathbf{j}_\pm|j\,m\rangle = (\mathbf{j}_1 \pm i\,\mathbf{j}_2)|j\,m\rangle &= \sqrt{j(j+1)-m(m\pm 1)}\,|j\,(m\pm 1)\rangle & (54) \end{aligned}$$

gelten, die für den Fall des normalen Drehimpulsoperators, $\vec{\mathbf{j}} = \vec{\mathbf{L}}$ mit $j = l$, bekannt sind. Wir wollen jetzt die $\mathbf{j}_i$ als lineare Abbildungen auf $\mathbb{C}^{2j+1}$ auffassen, und die $|j\,m\rangle$ mit $m \in \{-j, -j+1, \ldots, j\}$ seien eine geeignete Basis von $\mathbb{C}^{2j+1}$.

Dadurch ist auch der Fall $j = 1/2$ definiert, den wir im folgenden betrachten wollen. Wir haben es dann gerade mit dem Spinoperator $\vec{\mathbf{S}}$ mit Komponenten $\mathbf{S}_i$ zu tun. Die Basisvektoren sind dann

$$\left|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}. \tag{55}$$

Zeigen Sie:

(a) $\vec{\mathbf{S}} = \vec{\sigma}/2$ mit den Paulimatrizen σ_i erfüllt obige Beziehungen.

(b) $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ und $\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ bilden eine Basis der hermiteschen komplexen 2×2-Matrizen.

(c) Es gilt

$$\sigma_k \sigma_l = \delta_{kl} + i\varepsilon_{klm}\sigma_m \tag{56}$$

und damit

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}) = \vec{a}\cdot\vec{b} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})\,. \tag{57}$$

Hinweis: Betrachten Sie $[\sigma_k, \sigma_l]$ und $\{\sigma_k, \sigma_l\} = \sigma_k\sigma_l + \sigma_l\sigma_k$.

(d) Es gilt

$$\rho_{1/2}(R) \equiv \exp(-i\vec{\omega}\cdot\vec{\mathbf{S}}) = \cos\frac{\varphi}{2} - i\,\frac{\vec{\omega}\cdot\vec{\sigma}}{\varphi}\,\sin\frac{\varphi}{2}\,, \tag{58}$$

worin $\vec{\omega}$ der Drehvektor zu einer Drehung $R \in \mathrm{SO}(3)$ ist und $\varphi = |\vec{\omega}|$. Betrachten Sie insbesondere die Fälle $\varphi = 0$, 2π und 4π. Folgern Sie, daß $\rho_{1/2}$ keine eindeutige Abbildung der Drehungen ist.

Wir betrachten nun die lineare Abbildung

$$\begin{aligned} h : \mathrm{SU}(2) &\rightarrow \mathrm{SO}(3)\\ \alpha &\rightarrow h(\alpha)\,, \end{aligned} \tag{59}$$

$h(\alpha)\vec{e}_k = h_{jk}(\alpha)\vec{e}_j$ für orthonormale Basisvektoren $\vec{e}_i$ von $\mathbb{R}^3$, mit

$$\alpha\sigma_k\alpha^\dagger = h_{jk}(\alpha)\sigma_j\,. \tag{60}$$

(e) Überprüfen Sie:

(i) Für jedes $\alpha \in \mathrm{SU}(2)$ ist $h(\alpha)$ eine orthogonale Abbildung.
Hinweis: $\vec{a} \cdot \vec{a} = -\det(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})$ (warum?).

(ii) $\pm\mathrm{Id} \in \mathrm{SU}(2)$ werden auf $\mathrm{Id} \in \mathrm{SO}(3)$ abgebildet.

Bemerkung: Man kann weiterhin zeigen, daß *Bild*$(h) \simeq \mathrm{SO}(3)$, d. h. daß sich für jede Drehmatrix R ein $\alpha \in \mathrm{SU}(2)$ finden läßt, so dass $R = h(\alpha)$. h wird oft als (doppelte) Überlagerung bezeichnet, SU(2) entsprechend als Überlagerungsgruppe von SO(3).

Wir können nun eine Darstellung von SU(2) auf dem Hilbertraum $\mathcal{H}_{1/2}$ der Spin-1/2-Teilchen

$$D_{1/2} : \mathrm{SU}(2) \to \mathrm{Aut}\,\mathcal{H}_{1/2} \tag{61}$$

definieren durch

$$\big(D_{1/2}(\alpha)\,\chi\big)\,(\vec{x}) = \alpha\chi(h^{-1}(\alpha)\vec{x}) = \alpha\chi(R^{-1}\vec{x})\,. \tag{62}$$

(f) Überprüfen Sie, daß es sich hierbei um eine unitäre Darstellung handelt.

Schließlich induziert diese Darstellung der Überlagerungsgruppe SU(2) eine *Strahldarstellung* der Drehgruppe SO(3) auf $\mathcal{H}_{1/2}$. Dazu wählt man zu jeder Drehung $R \in \mathrm{SO}(3)$ zunächst einen — wie wir gesehen haben: nicht eindeutigen — Repräsentanten $\alpha \in \mathrm{SU}(2)$, für den $R = h(\alpha)$. Danach kann obige Darstellung der SU(2) verwendet werden.

Weitere Informationen unter:
http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~ewerz/qm2_09.html