

Übungen zur Quantenmechanik (T2)

Übungsblatt 14, Besprechung vom 31.01 – 04.02

Aufgabe 1 – Kohärente Zustände

In der Vorlesung haben Sie die sogenannten *kohärenten Zustände* kennengelernt, die definiert sind durch

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle,$$

wobei $\alpha = \rho e^{i\varphi}$, $\rho, \varphi \in \mathbb{R}$.

- (i) Vergewissern Sie sich zunächst, dass $|\alpha\rangle$ normiert ist.
- (ii) Zeigen Sie, dass kohärente Zustände $|\alpha\rangle$ Eigenzustände des Absteigeoperators a sind, d.h. dass

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle.$$

- (iii) Bestimmen Sie den Impuls-Erwartungswert

$$\text{Erw}_\alpha(\mathcal{P})(t) = \langle \alpha(t) | \mathcal{P} | \alpha(t) \rangle,$$

analog zur Berechnung von $\text{Erw}_\alpha(\mathcal{Q})$ in der Vorlesung.

- (iv) Überprüfen Sie die Bewegungsgleichung des Impuls-Erwartungswerts

$$\text{Erw}_\alpha(\mathcal{P}) = m \frac{d}{dt} \text{Erw}_\alpha(\mathcal{Q}).$$

- (v) Berechnen Sie $\text{Streu}_\alpha(\mathcal{Q})$ und $\text{Streu}_\alpha(\mathcal{P})$ und zeigen Sie die Unschärferelation

$$\text{Streu}_\alpha(\mathcal{Q}) \cdot \text{Streu}_\alpha(\mathcal{P}) = \frac{\hbar}{2}.$$

Solution

- (i) We compute, using $\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$,

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \alpha \rangle &= e^{-|\alpha|^2} \sum_{n,m} \frac{(\alpha^*)^n}{\sqrt{n!}} \frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}} \langle n | m \rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2} \sum_n \frac{(|\alpha|^2)^n}{n!} \\ &= e^{-|\alpha|^2} e^{|\alpha|^2} \\ &= 1. \end{aligned}$$

(ii) The creation and annihilation operators act as

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle.$$

We compute

$$\begin{aligned} a |\alpha\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} a |n\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n} |n-1\rangle \\ &= \alpha e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ &= \alpha |\alpha\rangle. \end{aligned}$$

(iii) We have $\mathcal{P} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (a^\dagger - a)$. The time-dependence is encoded in the complex parameter α since

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle(t) &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} |n\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} |n\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2 - i\omega t} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha(t))^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \end{aligned}$$

where we defined $\alpha(t) = \alpha(0)e^{i\omega t}$. We now compute

$$\begin{aligned} \text{Erw}_\alpha(\mathcal{P}) &= \langle \alpha(t) | \mathcal{P} | \alpha(t) \rangle \\ &= i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \langle \alpha(t) | a^\dagger - a | \alpha(t) \rangle \\ &= i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\alpha(t)^* - \alpha(t)) \\ &= \sqrt{2m\omega\hbar} \text{Im}(\alpha(t)) \\ &= -\sqrt{2m\omega\hbar} \rho \sin(\omega t - \varphi). \end{aligned}$$

(iv) The expectation value of the position operator is found by a similar computation

$$\begin{aligned} \text{Erw}_\alpha(\mathcal{Q}) &= \langle \alpha(t) | \mathcal{Q} | \alpha(t) \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \alpha(t) | a^\dagger + a | \alpha(t) \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha(t)^* + \alpha(t)) \\ &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \text{Re}(\alpha(t)) \\ &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \rho \cos(\omega t - \varphi). \end{aligned}$$

Computing the time derivative and multiplying by m , we find

$$m \frac{d}{dt} \text{Erw}_\alpha(\mathcal{Q}) = -\sqrt{\frac{2m\hbar}{\omega}} \rho \omega \sin \omega t = \text{Erw}_\alpha(\mathcal{P}).$$

(v) We compute the expectation value of \mathcal{Q}^2 explicitly. We have

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \mathcal{Q}^2 | \alpha \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | (a + a^\dagger)^2 | \alpha \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + (a^\dagger)^2 | \alpha \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | \alpha^2 + 2|\alpha|^2 + (\alpha^*)^2 + 1 | \alpha \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} ((\alpha + \alpha^*)^2 + 1). \end{aligned}$$

We similarly find all expectation values

$$\begin{aligned}(\text{Erw}_\alpha(\mathcal{Q}))^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega}(\alpha + \alpha^*)^2, \\ \text{Erw}_\alpha(\mathcal{Q}^2) &= \frac{\hbar}{2m\omega}(1 + (\alpha + \alpha^*)^2), \\ (\text{Erw}_\alpha(\mathcal{P}))^2 &= \frac{m\omega\hbar}{2}(\alpha - \alpha^*)^2, \\ \text{Erw}_\alpha(\mathcal{P}^2) &= \frac{m\omega\hbar}{2}(1 + (\alpha - \alpha^*)^2).\end{aligned}$$

We compute the variances and find

$$\begin{aligned}\langle \Delta \mathcal{Q} \rangle^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega} \\ \langle \Delta \mathcal{P} \rangle^2 &= \frac{m\omega\hbar}{2}.\end{aligned}$$

The uncertainty is then given by

$$\langle \Delta \mathcal{Q} \rangle \langle \Delta \mathcal{P} \rangle = \frac{\hbar}{2}.$$

Aufgabe 2 – Das Wasserstoffatom und seine Eigenzustände

In der Vorlesung wurden das Wasserstoffatom und seine Eigenfunktionen $\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ besprochen. Im Folgenden wollen wir deren Eigenschaften genauer untersuchen.

- (i) Nutzen Sie die Definition der Hauptquantenzahl n aus der Vorlesung, zusammen mit der Bedingung für die Quadratintegrabilität der Radiallösungen $R_{nl}(r)$, um zu zeigen, dass $l < n$. Argumentieren Sie nun, dass der Grad der Entartung für jedes Energieniveau n^2 ist.
- (ii) Berechnen Sie die Normierung für die ersten drei Radialfunktionen, $R_{10}(r)$, $R_{20}(r)$ und $R_{21}(r)$.
- (iii) Bestimmen Sie daraus die radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeit für $R_{10}(r)$ und $R_{21}(r)$. Plotten Sie beide gegeneinander und diskutieren Sie ihr Ergebnis.
- (iv) Berechnen Sie den Erwartungswert von $\left(\frac{r}{r_0}\right)^{-1}$ für die ersten fünf Energieeigenzustände. Nutzen Sie Ihr Ergebnis um den Erwartungswert für $\left(\frac{v^2}{c^2}\right)$ zu bestimmen, wobei v die Geschwindigkeit des Elektrons ist. Interpretieren Sie Ihr Ergebnis.
(Hinweis: $E_n = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{2\hbar n^2}$.)

Die ersten Radialwellenfunktionen sind proportional zu

$$R_{10}(r) \sim e^{-r}, \quad R_{20}(r) \sim \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-r/2}, \quad R_{21}(r) \sim r e^{-r/2}.$$

Solution

- (i) A similar derivation was performed in the lecture, although slightly different. The important results are that $R \sim r^l$ for small r and that the power-series for $R(r)$ has to stop at some finite order. This gives us a condition from which we derive $l < n$.

The radial Schrödinger equation for the central potential, after separation $\Psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$, is given by

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{nl}(r)}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{nl}(r) + \frac{2\mu^2}{\hbar^2} (E - V(r)) R_{nl}(r) = 0. \quad (1)$$

The asymptotic behaviour of the solution $R(r)$ as $r \rightarrow 0$ can be used to determine $l < n$. The Coulomb potential satisfies $r^2 V(r) \rightarrow 0$, hence Eq. 1 becomes

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{nl}(r)}{dr} \right) - l(l+1) R_{nl}(r) = 0,$$

for $r \rightarrow 0$. We make the ansatz $R(r) \sim r^a$ and obtain

$$s(s+1) - l(l+1) = 0,$$

which is solved by $s = l$ or $s = -(l+1)$. Since $l \geq 0$ and we want a normalisable solution, only $s = l$ is possible.

Next, we use the substitution $u(r) = rR(r)$ and the rescaled radius $\rho = \kappa r$ with κ defined via $E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_e}$. The radial equation becomes

$$-\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \left(-\frac{c}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) u = -u,$$

where $c = \frac{2m_e e^2}{\kappa \hbar^2}$. From the asymptotics, we know that $u(\rho) \sim \rho^{+1}$ as $\rho \rightarrow 0$, as well as $\rho \sim e^{-\rho}$ for $\rho \rightarrow \infty$. Thus we make the ansatz $u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} F(\rho)$. Inserting this ansatz into the radial equation, we find

$$\frac{d^2 F}{d\rho^2} - 2 \left(1 - \frac{l+1}{\rho}\right) \frac{dF}{d\rho} + \left(\frac{c-2l-2}{\rho}\right) F = 0.$$

We make a power-series ansatz $F = \sum_s a_s \rho^s$ and find

$$\sum_s a_s [s(s-1)\rho^{s-2} - 2s\rho^{s-1} + 2s(l+1)\rho^{s-2} + (c-2l-2)\rho^{s-1}] = 0.$$

Relabelling the summation yields

$$\sum_s \rho^{s-1} [s(s+1)a_{s+1} - 2sa_s + 2(s+1)(l+1)a_{s+1} + (c-2l-2)a_s] = 0.$$

As this holds for all $\rho > 0$, we obtain the recursion relation

$$(s+2l+2)(s+1)a_{s+1} = (-c+2s+2l+2)a_s.$$

The limit of large s gives the relation $\frac{a_{s+1}}{a_s} \rightarrow \frac{2}{s}$. This would imply that, for large s , the series scales as

$$F(\rho) \sim e^{2\rho},$$

so that $u(\rho) \sim e^\rho$, which is not normalisable. We can avoid this if we require that the series terminates for some s . This can only happen if c is a positive integer $c = 2n$ with $n \geq l+1$, leading to the termination at order $s = n-l-1$, so we find possible values of l in $l = 0, 1, \dots, n-1$.

End of derivation.

For a given n , we have $l = 0, \dots, n-1$ and for each l we have $2l+1$ values of m . We can compute the total degeneracy as

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2.$$

(ii) We have $R_{10}(r) \sim e^{-r}$, so

$$1 = \int dr |N|^2 r^2 e^{-2r} = |N|^2 \frac{1}{4},$$

so $N = 2$.

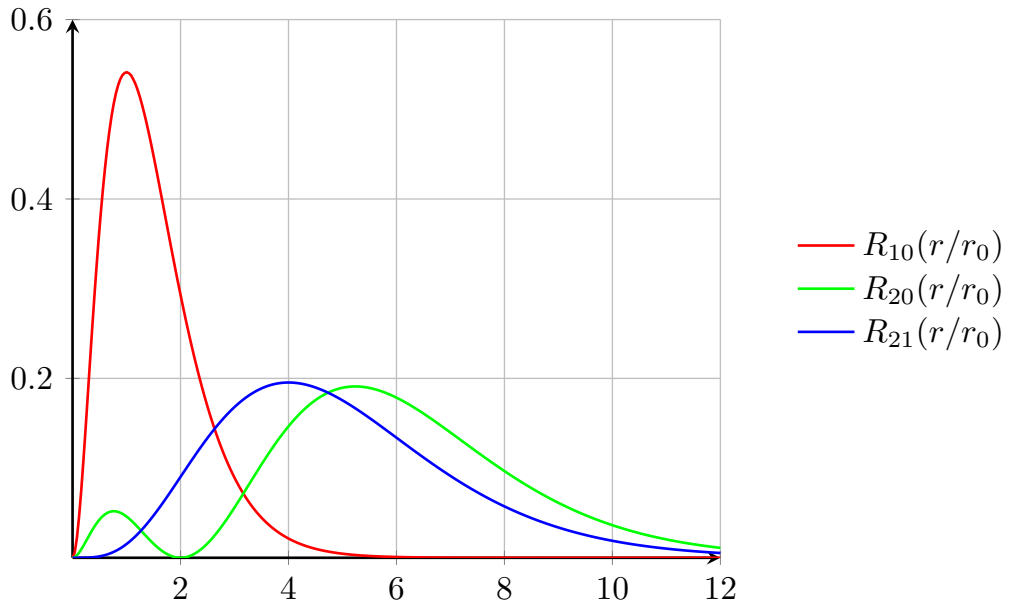
The second normalisation is computed to be

$$1 = \int dr |N|^2 r^2 \left(1 - \frac{r}{2}\right)^2 e^{-r} = 2|N|^2, \quad \Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

And finally

$$1 = \int dr |N|^2 r^4 e^{-r} = 24|N|^2, \quad \Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{24}}.$$

(iii) The probability densities are given by $P(r) = r^2 R_{nl}(r)$. The Plots are given below.



- (iv) We compute this using the virial theorem. The Coulomb potential is homogeneous of degree -1 , so the kinetic and potential energy expectation values are related by

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2}\langle V \rangle.$$

Combining this with $E = \langle T \rangle + \langle V \rangle$ we find

$$\langle V \rangle = 2E = \frac{e^4 m_e}{\hbar n^2}.$$

The kinetic energy is found via $\langle T \rangle = -\frac{1}{2}\langle V \rangle$.

Aufgabe 3 – Störungstheorie ohne Spin

Nun betrachten wir das obige Wasserstoffatom in einem elektrischen und einem magnetischen Feld. Um die Rechnung zu vereinfachen, nehmen wir im Folgenden an, dass weder der Kern noch das Elektron Spin tragen (d.h. die Spin-Bahn Kopplung wird vernachlässigt). Wir betrachten im Folgenden nur Zustände mit $n = 2$.

- (i) Der Hamiltonoperator in Gegenwart eines magnetischen Feldes \mathbf{B} in z -Richtung ist gegeben durch

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{r} + \frac{eB}{2m_e} L_z.$$

Berechnen Sie die Korrekturen der Energien E_{nlm} für schwache Magnetfelder in erster Ordnung. Für welche Zustände wird die Entartung des $n = 2$ Niveaus aufgehoben?

- (ii) Wiederholen Sie den obigen Vorgang für ein elektrisches Feld \mathcal{E} , also für $\mathcal{H}_{WW} = e\mathcal{E}z$. Werten Sie die Integrale über die radialen Funktionen dabei nicht explizit aus, sondern ersetzen Sie diese durch einen Parameter. Gleiches gilt für die Integrale über die Kugelflächenfunktionen, sofern sie nicht verschwinden.

Hinweis: Die folgende Identität könnte hilfreich sein:

$$\cos\theta Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1,m} + \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)}} Y_{l-1,m}.$$

Solution

- (i) We need to compute the matrix elements

$$\left\langle nl'm' \left| \frac{eB}{2m_e} L_z \right| nlm \right\rangle = \frac{eBm}{2m_e} \delta_{l'l} \delta_{m'm},$$

so the degenerate eigenstates are already the correct basis for the perturbation to be diagonal. We see that the magnetic field gives an energy shift

$$\Delta E_m = \frac{eB}{2m_e} m,$$

so the degeneracy is lifted and we can distinguish states with $m = 0$ (two degenerate states), $m = 1$ (one state) and $m = -1$ (one state).

- (ii) The ground state is non-degenerate, and we compute the correction as

$$\Delta E_1 = \langle 100 | H_{\text{Int}} | 100 \rangle = 0,$$

since the wave function is spherically symmetric.

The first excited state has four-fold degeneracy, with wave-functions

$$\begin{aligned} |200\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}a^{\frac{3}{2}}} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} e^{-\frac{r}{2a}} \\ |210\rangle &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{24}a^{\frac{5}{2}}} r e^{-\frac{r}{2a}} \cos\theta \\ |211\rangle &= -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{24}a^{\frac{5}{2}}} r e^{-\frac{r}{2a}} \sin\theta e^{i\varphi} \\ |21-1\rangle &= \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{24}a^{\frac{5}{2}}} r e^{-\frac{r}{2a}} \sin\theta e^{-i\varphi}. \end{aligned}$$

The perturbation in spherical coordinates is proportional to $z = r \cos \theta$, so we are interested in the θ integration of the matrix elements $\langle \alpha | H_{\text{int}} | \beta \rangle$ at first. Using orthogonality of the trigonometric functions, we see that the only surviving amplitudes are

$$\langle 200 | H_{\text{int}} | 210 \rangle, \quad \langle 211 | H_{\text{int}} | 210 \rangle, \quad \langle 21 - 1 | H_{\text{int}} | 210 \rangle.$$

Next, note that the φ integration kills both $\langle 211 | H_{\text{int}} | 210 \rangle$ and $\langle 21 - 1 | H_{\text{int}} | 210 \rangle$, so there is only one non-vanishing matrix element, namely $\langle 200 | H_{\text{int}} | 210 \rangle$, which we compute to be

$$\langle 200 | H_{\text{int}} | 210 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}a^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{24}a^{\frac{5}{2}}} e\mathcal{E} \int dr d\theta d\varphi r^2 \sin \theta \left(1 - \frac{r}{2a} \right) r \cos \theta e^{-\frac{r}{a}} r \cos \theta = -3ae\mathcal{E}.$$

We see that the degeneracy is lifted into 3 distinct states. We have to compute the eigenvectors of the matrix $\langle \alpha | H_{\text{int}} | \beta \rangle$ to find the new eigenstates. Writing this as a matrix, we see

$$\langle \alpha | H_{\text{int}} | \beta \rangle = \begin{pmatrix} 0 & -3ae\mathcal{E} & 0 & 0 \\ -3ae\mathcal{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

with columns corresponding to $|200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21 - 1\rangle$, respectively. It has eigenvalues $\pm 3ae\mathcal{E}$ and 0. The new eigenstates are thus given by

$$|211\rangle, \quad |21 - 1\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle - |210\rangle), \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|200\rangle + |210\rangle),$$

where the symmetric combination has $-3ae\mathcal{E}$ and the antisymmetric has $3ae\mathcal{E}$. The $m = \pm 1$ states are still degenerate. This effect gives the ‘‘opposite’’ splitting as the Zeeman effect discussed above.