Technische Universität
Wien

Ass.-Prof. Dr. A. Toschi, Prof. Dr. K. Held
Dipl.-Ing. Dr. G. Rohringer, Dipl.-Ing. T. Schäfer

2. Test zur Quantentheorie II

Wintersemester 2014/2015

Test A **Name:** **Matrikelnummer:**

A1	A2	A3	A4	Σ
14	12	11+3*	13+2*	50+5*

1. Theorieaufgaben

4+3+4+3=14 Punkte

a) Betrachten Sie das F^- Ion ($Z = 9$). Der (nicht entartete) Grundzustand ist durch die Elektronen-Konfiguration $\{1s^2,\ 2s^2,\ 2\mathrm{p}^6\}$ gegeben. Wie würden sich die Energie und die Entartung des Grundzustandes dieses Ions ändern, falls die Elektronen Teilchen mit Spin $\frac{7}{2}$ wären? *[Hinweis: Vernachlässigen Sie hier alle Effekte der Elektron-Elektron Wechselwirkung, so wie alle relativistischen Korrekturen. Die Energie des Grundzustandes des (1s) Elektrons in einem wasserstoffartigen Atom beträgt Z^2E_I, mit $E_I = -13.6eV$.]*

b) Welche der folgenden Wellenfunktionen lassen sich durch welchen der gegebenen Symmetrieoperatoren ineinander überführen? Wellenfunktionen: $e^{-\alpha|\vec{r}+\vec{a}|}$, $Y_{10}(\theta,\phi)$,$e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$, $e^{-\alpha|\vec{r}|}$, $e^{+\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$, $\frac{1}{\sqrt{2}}[Y_{11}(\theta,\phi)+Y_{1-1}(\theta,\phi)]$; Symmetrieoperatoren: $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\vec{a}}$, $e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\pi}{2}\hat{L}_y}$, $\hat{P}$ (Parität). *[Hinweis: $Y_{1-1}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin(\theta)e^{-i\phi}$, $Y_{10}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\theta)$, $Y_{11}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin(\theta)e^{+i\phi}$.]*

c) Geben Sie die Wellenfunktion (Orts- und Spinor-Anteil) für ein relativistisches Elektron an, das sich mit positiver Energie $E > 0$ und dem Impuls p in positive x-Richtung bewegt und dessen Spin in positive y-Richtung zeigt.

d) Gegeben seien drei nicht wechselwirkende (i) unterscheidbare Teilchen, (ii) Spin-0 Teilchen und (iii) Spin-$\frac{1}{2}$ Teilchen. Der Hamilton-Operator sei jeweils der Gleiche. Welches dieser Systeme hat im Allgemeinen die niedrigste Grundzustandsenergie? (mit Begründung).

2. Bewegtes δ-Potential

5+4+3=12 Punkte

Betrachten Sie folgendes eindimensionale zeitabhängige Potential:

$$\hat{V}(x,t) = -\alpha\delta(x - vt),\ \alpha, v > 0.$$

a) Lösen Sie die entsprechende zeitabhängige eindimensionale Schrödingergleichung zur Anfangsbedingung $\psi(x, t = 0) = \psi_0(x) = \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}}e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|+i\frac{vm}{\hbar}x}$. *(Hinweis: Die Transformation in ein mit der Geschwindigkeit v bewegtes Bezugssystem ist durch den Galilei-Operator $\hat{G}(v,t) = e^{-i\frac{v}{\hbar}(m\hat{x}-t\hat{p})} = e^{-i\frac{v}{\hbar}m\hat{x}}e^{+i\frac{v}{\hbar}t\hat{p}}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{mv^2}{2}t}$ gegeben.)*

b) Berechnen Sie explizit die Erwartungswerte für Orts- und Impulsoperator. Interpretieren Sie Ihr Ergebnis physikalisch und geben Sie insbesondere Begründungen für die Zeit(un)abhängigkeit dieser Erwartungswerte an!

c) Geben Sie den Erwartungswert der Gesamtenergie an (auch ohne Rechnung möglich).

3. Erweitertes attraktives Hubbard Modell

3+3+5+3=11+3* Punkte*

Betrachten Sie das folgende Modell für Elektronen auf zwei Gitterplätzen mit attraktiver Wechselwirkung:

$$\hat{H} = -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(\hat{c}^\dagger_{1,\sigma}\hat{c}_{2,\sigma} + \hat{c}^\dagger_{2,\sigma}\hat{c}_{1,\sigma} \right) - U \sum_{i=1,2} \hat{n}_{i,\uparrow}\hat{n}_{i,\downarrow} - \frac{V}{2}(\hat{n}_{1,\uparrow} + \hat{n}_{1,\downarrow})(\hat{n}_{2,\uparrow} + \hat{n}_{2,\downarrow}).$$

In dieser Formel sind $\hat{c}^\dagger_{i,\sigma}/\hat{c}_{i,\sigma}$ die Erzeugungs/Vernichtungs-Operatoren eines Elektrons mit Spin $S_z = +\frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}$ $(\sigma =\uparrow,\downarrow)$ auf dem Platz $i = 1, 2$, $n_{i,\sigma} = \hat{c}^\dagger_{i,\sigma}\hat{c}_{i,\sigma}$.

Berechnen Sie die Energie und die Entartung des *Grundzustands* des Systems

a) im Fall, dass das System nur *ein* Elektron hat (mit $t > 0, U > 0, V > 0$);

b) im Fall, dass das System *vier* Elektronen hat (mit $t > 0, U > 0, V > 0$);

c) für ein System mit *zwei* Elektronen, aber mit $t = 0, U > 0, V > 0$, in Abhängigkeit von den Werten von U und V. Geben Sie hier auch den(die) entsprechenden Eigenvektor(en) in zweiter Quantisierung an.

d)*Berechnen Sie den Erwartungswert der Doppel-Besetzung pro Gitterplatz, d.h. $\hat{n}_d = \frac{1}{2}(\hat{n}_{1,\uparrow}\hat{n}_{1,\downarrow} + \hat{n}_{2,\uparrow}\hat{n}_{2,\downarrow})$, im Grundzustand für die drei Fälle **a)**, **b)** und **c)**.

4. Relativistischer Spin und Bahndrehimpuls

6+3+4+2=13+2* Punkte*

Betrachten Sie die stationäre Dirac-Gleichung für das Wasserstoffatom unter der Annahme, dass $\frac{m_{\text{Elektron}}}{m_{\text{Proton}}} \to 0$, d.h., dass die Bewegung des Atomkerns vernachlässigt werden kann:

$$H_D\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad \text{mit} \quad \hat{H}_D = c\vec{\alpha}\hat{\vec{p}} + \beta mc^2 + \hat{V}(r)\mathbb{1}_{4\times4},$$

wobei $r = |\vec{r}|$ und $V(r)$ das Coulombpotential des Elektrons im Feld des Protons darstellt.

a) Berechnen Sie, welche der folgenden Observablen eine Erhaltungsgrößen für dieses System ist: $\hat{\vec{S}}^2_D$, $\hat{S}_{D,i}$, $\hat{L}_{D,i}$, $\hat{\vec{L}}^2_D$ $(i = x, y, z)$? $\hat{\vec{L}}_D = (\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}})\mathbb{1}_{4\times4}$ bezeichnet hierbei den Bahndreimpulsoperator, während der Spinoperator durch $\hat{\vec{S}}_D = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0_{2\times2} \\ 0_{2\times2} & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$ gegeben ist ($\vec{\sigma}$ bezeichnet die Pauli-Matrizen); *(Hinweis:* $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$*).*

b) Zeigen Sie nun, dass die Komponenten des *Gesamtdrehimpulses* $\vec{J}_D = \vec{L}_D + \vec{S}_D$ Erhaltungsgrößen sind.

c) Betrachten Sie nun die folgende nicht-relativistische Näherung der obigen Dirac Gleichung: $\left[\left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{V}(r) - \frac{1}{8m^3c^2}(\hat{\vec{p}}^2)^2 + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \triangle \hat{V}(r)\right)\mathbb{1}_{2\times2} + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{d\hat{V}(r)}{dr}\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}\right]\psi_1(\vec{r}) = \varepsilon\psi_1(\vec{r})$, wobei $\psi_1(\vec{r})$ nun ein zweidimensionaler Spinor und ε die nicht-relativistische Energie ($E = mc^2 + \varepsilon$) des Elektrons ist. Überlegen Sie zunächst, welche Terme dieses Hamilton-Operators sicher mit $\vec{L}$ bzw. $\vec{S}$ kommutieren. Zeigen Sie in Folge, dass für diesen Hamiltonoperator wiederum $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$, nicht aber $\hat{\vec{L}}$ und $\hat{\vec{S}}$, Erhaltungsgrößen sind. Welcher Term im Hamilton-Operator ist dafür verantwortlich, dass $\hat{\vec{L}}$ und $\hat{\vec{S}}$ nicht unabhängig voneinander erhalten sind?

d)*Machen Sie nun für $\psi_1(\vec{r})$ den Produktansatz $\psi_1(\vec{r}) = f(r)\mathcal{Y}(\theta,\phi)$, wobei $f(r)$ eine skalare Funktion der radialen Koordinate r und $\mathcal{Y}(\theta,\phi)$ eine zweikomponentige Spinor-Wellenfunktion bezeichnet. Drücken Sie $\mathcal{Y}(\theta,\phi)$ explizit durch Kugelflächenfunktionen Y_{lm} und Zweierspinoren aus. (*Hinweis:* $\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}} = \frac{1}{2}(\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{L}}^2 - \hat{\vec{S}}^2)$. *Sie müssen die entsprechenden Vorfaktoren [Clebsch-Gordan Koeffizienten] nicht explizit angeben.*)

Viel Erfolg!

Technische Universität Wien

Ass.-Prof. Dr. A. Toschi, Prof. Dr. K. Held
Dipl.-Ing. Dr. G. Rohringer, Dipl.-Ing. T. Schäfer

2. Test zur Quantentheorie II

Wintersemester 2014/2015

Test B **Name:** **Matrikelnummer:**

B1	B2	B3	B4	Σ
12	11+3*	14	13+2*	50+5*

1. Eindimensionales Potential in Bewegung

5+4+3=12 Punkte

Betrachten Sie folgendes eindimensionale zeitabhängige Potential:

$$\hat{V}(x,t) = -C\delta(x-wt),\ C, w > 0.$$

a) Lösen Sie die entsprechende zeitabhängige eindimensionale Schrödingergleichung zur Anfangsbedingung $\psi(x,t=0) = \psi_0(x) = \sqrt{\frac{mC}{\hbar^2}} e^{-\frac{mC}{\hbar^2}|x| + i\frac{wm}{\hbar}x}$. (*Hinweis: Die Transformation in ein mit der Geschwindigkeit w bewegtes Bezugssystem ist durch den Galilei-Operator* $\hat{G}(w,t) = e^{-i\frac{w}{\hbar}(m\hat{x}-t\hat{p})} = e^{-i\frac{w}{\hbar}m\hat{x}} e^{+i\frac{w}{\hbar}t\hat{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{mw^2}{2}t}$ *gegeben.*)

b) Berechnen Sie explizit die Erwartungswerte für Orts- und Impulsoperator. Interpretieren Sie Ihr Ergebnis physikalisch und geben Sie insbesondere Begründungen für die Zeit(un)abhängigkeit dieser Erwartungswerte an!

c) Geben Sie den Erwartungswert der Gesamtenergie an (auch ohne Rechnung möglich).

2. Erweitertes attraktives Hubbard Modell

3+3+5+3=11+3* Punkte*

Betrachten Sie das folgende Modell für Elektronen auf zwei Gitterplätzen mit attraktiver Wechselwirkung:

$$\hat{H} = -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(\hat{c}^\dagger_{1,\sigma}\hat{c}_{2,\sigma} + \hat{c}^\dagger_{2,\sigma}\hat{c}_{1,\sigma} \right) - U \sum_{i=1,2} \hat{n}_{i,\uparrow}\hat{n}_{i,\downarrow} - U'(\hat{n}_{1,\uparrow} + \hat{n}_{1,\downarrow})(\hat{n}_{2,\uparrow} + \hat{n}_{2,\downarrow}).$$

In dieser Formel sind $\hat{c}^\dagger_{i,\sigma}/\hat{c}_{i,\sigma}$ die Erzeugungs/Vernichtungs-Operatoren eines Elektrons mit Spin $S_z = +\frac{\hbar}{2}, -\frac{\hbar}{2}$ ($\sigma =\uparrow,\downarrow$) auf dem Platz $i = 1,2$, $n_{i,\sigma} = \hat{c}^\dagger_{i,\sigma}\hat{c}_{i,\sigma}$.

Berechnen Sie die Energie und die Entartung des *Grundzustands* des Systems

a) im Fall, dass das System nur *ein* Elektron hat (mit $t > 0, U > 0, U' > 0$);

b) im Fall, dass das System *vier* Elektronen hat (mit $t > 0, U > 0, U' > 0$);

c) für ein System mit *zwei* Elektronen, aber mit $t = 0, U > 0, U' > 0$, in Abhängigkeit von den Werten von U und U'. Geben Sie hier auch den(die) entsprechenden Eigenvektor(en) in zweiter Quantisierung an.

d)*Berechnen Sie den Erwartungswert der Doppel-Besetzung pro Gitterplatz, d.h. $\hat{n}_d = \frac{1}{2}(\hat{n}_{1,\uparrow}\hat{n}_{1,\downarrow} + \hat{n}_{2,\uparrow}\hat{n}_{2,\downarrow})$, im Grundzustand für die drei Fälle **a)**, **b)** und **c)**.

3. Verständnisfragen

4+3+4+3=14 Punkte

a) Geben Sie die Wellenfunktion (Orts- und Spinor-Anteil) für ein relativistisches Elektron an, das sich mit positiver Energie $E > 0$ und dem Impuls p in positive x-Richtung bewegt und dessen Spin in positive y-Richtung zeigt.

b) Welche der folgenden Wellenfunktionen lassen sich durch welchen der gegebenen Symmetrieoperatoren ineinander überführen? Wellenfunktionen: $e^{-\alpha|\vec{r}+\vec{a}|}$, $Y_{10}(\theta,\phi)$,$e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$, $e^{-\alpha|\vec{r}|}$, $e^{+\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}}$, $\frac{1}{\sqrt{2}}[Y_{11}(\theta,\phi)+Y_{1-1}(\theta,\phi)]$; Symmetrieoperatoren: $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\vec{a}}$, $e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\pi}{2}\hat{L}_y}$, $\hat{P}$ (Parität). *[Hinweis:* $Y_{1-1}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin(\theta)e^{-i\phi}$, $Y_{10}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\theta)$, $Y_{11}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin(\theta)e^{+i\phi}$.*]*

c) Betrachten Sie das Na^+ Ion ($Z = 11$). Der (nicht entartete) Grundzustand ist durch die Elektronen-Konfiguration $\{1s^2,\ 2s^2,\ 2p^6\}$ gegeben. Wie würden sich die Energie und die Entartung des Grundzustandes dieses Ions ändern, falls die Elektronen Teilchen mit Spin $\frac{7}{2}$ wären? *[Hinweis: Vernachlässigen Sie hier alle Effekte der Elektron-Elektron Wechselwirkung, so wie alle relativistischen Korrekturen. Die Energie des Grundzustandes des (1s) Elektrons in einem wasserstoffartigen Atom beträgt $Z^2\varepsilon_0$, mit $\varepsilon_0 = -13.6eV$.]*

d) Gegeben seien drei nicht wechselwirkende (i) unterscheidbare Teilchen, (ii) Spin-0 Teilchen und (iii) Spin-$\frac{1}{2}$ Teilchen. Der Hamilton-Operator sei jeweils der Gleiche. Welches dieser Systeme hat im Allgemeinen die niedrigste Grundzustandsenergie? (mit Begründung).

4. Drehimpuls in der Dirac-Theorie

6+3+4+2=13+2* Punkte*

Betrachten Sie die stationäre Dirac-Gleichung für das Wasserstoffatom unter der Annahme, dass $\frac{m_{\text{Elektron}}}{m_{\text{Proton}}} \to 0$, d.h., dass die Bewegung des Atomkerns vernachlässigt werden kann:

$$H_D\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad \text{mit} \quad \hat{H}_D = c\vec{\alpha}\hat{\vec{p}} + \beta mc^2 + \hat{V}(r)\mathbb{1}_{4\times 4},$$

wobei $r = |\vec{r}|$ und $V(r)$ das Coulombpotential des Elektrons im Feld des Protons darstellt.

a) Berechnen Sie, welche der folgenden Observablen eine Erhaltungsgrößen für dieses System ist: $\hat{\vec{S}}_D^2$, $\hat{S}_{D,i}$, $\hat{L}_{D,i}$, $\hat{\vec{L}}_D^2$ $(i = x, y, z)$? $\hat{\vec{L}}_D = (\hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}})\mathbb{1}_{4\times 4}$ bezeichnet hierbei den Bahndreimpulsoperator, während der Spinoperator durch $\hat{\vec{S}}_D = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0_{2\times 2} \\ 0_{2\times 2} & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$ gegeben ist ($\vec{\sigma}$ bezeichnet die Pauli-Matrizen); *(Hinweis:* $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = \hat{A}[\hat{B},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$*).*

b) Zeigen Sie nun, dass die Komponenten des *Gesamtdrehimpulses* $\vec{J}_D = \vec{L}_D + \vec{S}_D$ Erhaltungsgrößen sind.

c) Betrachten Sie nun die folgende nicht-relativistische Näherung der obigen Dirac Gleichung: $\left[\left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \hat{V}(r) - \frac{1}{8m^3c^2}(\hat{\vec{p}}^2)^2 + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\triangle\hat{V}(r)\right)\mathbb{1}_{2\times 2} + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{d\hat{V}(r)}{dr}\hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{S}}\right]\psi_1(\vec{r}) = \varepsilon\psi_1(\vec{r})$, wobei $\psi_1(\vec{r})$ nun ein zweidimensionaler Spinor und ε die nicht-relativistische Energie ($E = mc^2 + \varepsilon$) des Elektrons ist. Überlegen Sie zunächst, welche Terme dieses Hamilton-Operators sicher mit $\vec{L}$ bzw. $\vec{S}$ kommutieren. Zeigen Sie in Folge, dass für diesen Hamiltonoperator wiederum $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$, nicht aber $\hat{\vec{L}}$ und $\hat{\vec{S}}$, Erhaltungsgrößen sind. Welcher Term im Hamilton-Operator ist dafür verantwortlich, dass $\hat{\vec{L}}$ und $\hat{\vec{S}}$ nicht unabhängig voneinander erhalten sind?

d)* Machen Sie nun für $\psi_1(\vec{r})$ den Produktansatz $\psi_1(\vec{r}) = f(r)\mathcal{Y}(\theta,\phi)$, wobei $f(r)$ eine skalare Funktion der radialen Koordinate r und $\mathcal{Y}(\theta,\phi)$ eine zweikomponentige Spinor-Wellenfunktion bezeichnet. Drücken Sie $\mathcal{Y}(\theta,\phi)$ explizit durch Kugelflächenfunktionen Y_{lm} und Zweierspinoren aus. (*Hinweis:* $\hat{\vec{L}}\hat{\vec{S}} = \frac{1}{2}(\hat{\vec{J}}^2 - \hat{\vec{L}}^2 - \hat{\vec{S}}^2)$. *Sie müssen die entsprechenden Vorfaktoren [Clebsch-Gordan Koeffizienten] nicht explizit angeben.*)

Viel Erfolg!