Aufgabenblatt 4

1 Sphärische Tensoroperatoren

a) Die sphärischen Komponenten $\hat{V}_q^1$ eines Vektoroperators können wie folgt durch die kartesischen Komponenten ausgedrückt werden:

$$\hat{V}_{\pm 1}^1 = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{V}_x \pm i\hat{V}_y),$$
$$\hat{V}_0 = \hat{V}_z.$$

Berechnen Sie mit Hilfe von $[\hat{J}_i, \hat{V}_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{V}_k$ den Kommutator

$$[\hat{J}_\pm, \hat{V}_q^1].$$

b) Ein sphärischer Tensor $\hat{T}_q^{(k)}$ ist dadurch definiert, dass er sich unter einer Rotation um eine beliebige Achse, welche mit Hilfe des Rotationsoperators $\hat{\mathfrak{D}}$ beschrieben wird, folgendermaßen transformiert:

$$\hat{\mathfrak{D}}\,\hat{T}_q^{(k)}\,\hat{\mathfrak{D}}^\dagger = \sum_{q'=-k}^{k} \mathfrak{D}_{q'\,q}^{(k)} \hat{T}_{q'}^{(k)},$$

wobei $\mathfrak{D}_{q'\,q}^{(k)}$ die Matrixelemente des Rotationsoperators sind. Zeigen Sie, dass diese Definition für infinitesimale Drehwinkel zu folgender Kommutator-Beziehung führt:

$$\left[\hat{J}_\pm, \hat{T}_q^{(k)}\right] = \hbar\sqrt{k(k+1) - q(q\pm 1)}\,\hat{T}_{q\pm 1}^{(k)}.$$

Zeigen Sie, dass Ihr Ergebnis für Vektoroperatoren mit der erhaltenen Kommutator-Beziehung aus (a) zusammenpasst.

1 Kreuz

2 Kramers Theorem

a) Betrachten Sie ein quantenmechanisches System im Zustand $|\psi\rangle$. Eine zweimalige Anwendung des Zeitumkehroperators $\hat{T}$ darf per definitionem physikalisch keine Auswirkung haben, weswegen $\hat{T}^2|\psi\rangle = c|\psi\rangle$ mit $|c| = 1$ gilt. Zeigen Sie für beliebiges $|\psi\rangle$, dass c nur die Werte ± 1 annehmen kann.
Hinweis: Betrachten Sie die Wirkung von $\hat{T}^2$ auf den Zustand $|\psi\rangle + \hat{T}|\psi\rangle$.

b) Argumentieren Sie nun, warum in einem System mit ungerader Anzahl von Spin-$1/2$-Teilchen (das heißt halbzahligem Gesamtspin) die Eigenwerte c von $\hat{T}^2$ immer den Wert $c = -1$ annehmen.
Hinweis: Bringen Sie $\hat{T}^2$ mit dem Rotationsoperator $\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma)$ in Verbindung.

c) Beweisen Sie nun das Kramers-Theorem, demzufolge ein System mit Zeitumkehr-Invarianz und halbzahligem Gesamtspin nur Eigenwerte besitzt, die mindestens zweifach entartet sind.

d) Argumentieren Sie, warum im Allgemeinen der Grad der Entartung für derartige Systeme geradzahlig sein muss. Zeigen Sie explizit, dass dreifache Entartung nicht möglich ist.

e) Betrachten Sie das Elektron eines Wasserstoffatoms in einem Zustand mit Hauptquantenzahl $n = 1$. Laut Ihrem Beweis aus b) muss es nun zum Energieeigenwert $E_{n=1}$ mindestens zwei entartete Zustände geben. Schreiben Sie diese an.

(abc) + (de) = 2 Kreuze

3 Störungstheorie: Morse-Potential

Im Vergleich zum harmonischen Oszillator ist das Morse-Potential, $V(x) = D_e\big(1-e^{-ax}\big)^2$, ein quantitativ besseres Modell zur Beschreibung der Wechselwirkung zwischen den Atomen eines zweiatomigen Moleküls (H2, O2, ...). Berechnen Sie mit diesem Modell die Nullpunktsenergie (Grundzustandsenergie) eines zweiatomigen Moleküls mithilfe der Störungstheorie (Korrektur erster Ordnung). Nutzen Sie, dass Sie die exakte Lösung des harmonischen Oszillators kennen.

Ansatz + Rechnung = 2 Kreuze