# Übungen zur Atom- und Quantenphysik

Prof. Dr. M. Klasen, Prof. Dr. H. Zacharias

## Blatt 7

Abgabe: 30.05.2014
Besprechung: 03.06.2014

### Aufgabe 31: Amoniakmolekül (6 Punkte)

Das Amoniakmolekül läßt sich idealisiert als ein quantenmechanisches System mit zwei Zuständen betrachten: Der Zustandsvektor $|1\rangle$ bzw. $|2\rangle$ beschreibe die Konfiguration, bei der sich das Stickstoffatom über bzw. unter der durch die drei Wasserstoffatome bestimmten Ebene befindet.
Dann läßt sich der Zustandsvektor $|\psi(t)\rangle$ und der Hamiltonoperator $H$ bezüglich der orthonormierten Basis $|j\rangle$ , $j = 1, 2$, darstellen:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_{j=1}^{2} c_j(t)\,|j\rangle \qquad \text{mit} \qquad c_j(t) = \langle j|\psi(t)\rangle \\ H &= \sum_{i,j=1}^{2} H_{ij}\,|i\rangle\langle j| \qquad \text{mit} \qquad H_{ij} = \langle i|H|j\rangle \end{aligned}$$

(a) Sei $S$ der Operator, der die Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$ vertauscht ($S|1\rangle = |2\rangle$, $S|2\rangle = |1\rangle$). Welche Eigenschaften hat $S$? Da das System invariant ist unter der Vertauschung von $|1\rangle$ und $|2\rangle$, muß $S$ mit $H$ kommutieren. Begründen Sie dies. Was folgt daraus für die Matrixelemente von $H$?

(b) Geben Sie die stationären Zustände und die zugehörigen Energieeigenwerte dieses Systems an.

(c) Das System befindet sich zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zustand $|1\rangle$. Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeit $P_j$, das System zur Zeit $t = t_0$ im Zustand $|j\rangle$ zu finden.

### Aufgabe 32: Pauli-Matrizen (10 Punkte)

Jede spurlose hermitesche $2 \times 2$-Matrix läßt sich als linearkombination der drei Pauli-Matrizen schreiben:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(a) Zeigen Sie, daß mit der unitären Matrix

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}$$

die folgende Beziehungen

$$U^\dagger \sigma_j U = \sigma_{j+1} \tag{2}$$

mit $j = 1, 2, 3$ und $\sigma_4 \equiv \sigma_1$ gelten.

(b) Beweisen Sie die Formel (die Summation Konvention nicht vergessen)

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} 1 + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k$$

zunächst für $(i,j) \in \{(3,3),(1,3),(3,1)\}$. Benutzen Sie dann (2), um die übrigen Fälle mit $i,j \in \{1,2,3\}$ zu zeigen.

(c) Zeigen Sie

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \qquad \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} 1$$

wobei $\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i$ ist. Beweisen Sie für $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{C}^3$

$$(\mathbf{a}.\boldsymbol{\sigma})(\mathbf{b}.\boldsymbol{\sigma}) = (\mathbf{a}.\mathbf{b})\mathbf{1} + i(\mathbf{a} \times \mathbf{b}).\boldsymbol{\sigma}$$

wobei $\mathbf{a}.\boldsymbol{\sigma} \equiv a_i \sigma_i$ ist.

(d) Zeigen Sie für $\phi \in \mathbb{R}$ und $\mathbf{n} \in \mathbb{R}^3$ mit $|\mathbf{n}| = 1$, dass gilt

$$e^{i\phi \mathbf{n}.\boldsymbol{\sigma}/2} = \mathbf{1} \cos\frac{\phi}{2} + i\mathbf{n}.\boldsymbol{\sigma} \sin\frac{\phi}{2}$$

*Hinweis:* Wenden Sie (c) auf $(\mathbf{n}.\boldsymbol{\sigma})^2$ an, um die Exponentialreihe aufzusummieren.

(e) Betrachten Sie nun (für $|\mathbf{n}| = 1$) einen beliebigen Vektor $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$ und definieren Sie $\mathbf{a}_\perp = \mathbf{a} - (\mathbf{n}.\mathbf{a})\mathbf{n}$. Verifizieren Sie, daß $\mathbf{n}$, $\mathbf{a}_\perp$ und $\mathbf{n} \times \mathbf{a}$ zueinander orhtogonal sind. Berechnen Sie $|\mathbf{a}_\perp|^2$ und $|\mathbf{n} \times \mathbf{a}|^2$. Betrachten Sie nun den Vektor $\mathbf{a}'$, der durch Rotation von $\mathbf{a}$ um die Achse $\mathbf{n}$ mit Winkel $\phi$ hervorgeht. Bestätigen Sie durch eine Zeichnung, dass $\mathbf{a}$ gegeben ist durch

$$\mathbf{a}' = (\mathbf{a}.\mathbf{n})\mathbf{n} + \mathbf{a}_\perp \cos\phi + \mathbf{n} \times \mathbf{a} \sin\phi.$$

Berechnen Sie den durch

$$(\mathbf{b}.\boldsymbol{\sigma}) = e^{-i\phi \mathbf{n}.\boldsymbol{\sigma}/2} (\mathbf{a}.\boldsymbol{\sigma}) e^{i\phi \mathbf{n}.\boldsymbol{\sigma}/2}$$

definierten Vektor $\mathbf{b}$ mit Hilfe von (c) und (d). Wie hängt $\mathbf{b}$ mit $\mathbf{a}$ zusammen?

## Aufgabe 33: Orts- und Impulsoperator (4 Punkte)

Die Funktionen $f(x)$ und $g(x)$ und deren Ableitungen sollen im Unendlichen genügend schnell abfallen, so daß alle nachfolgende Ausdrücke existieren. Sie sind normiert bzgl. des Skalarproduktes

$$(f, g) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f^*(x) g(x)$$

d.h. $(f, f) = (g, g) = 1$.

Der Ortsoperator $Q$ und Impulsoperator $P$ sind definiert durch $Qf(x) = xf(x)$ und $Pf(x) = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial x}$. Zeigen Sie:

(a) $(Qf, g) = (f, Qg)$ und $(Pf, g) = (f, Pg)$, d.h. $P$ und $Q$ sind hermitisch.

(b) Die Erwartungswerte von $Q$ und $P$ im Zustand f, $\bar{q} = (f, Qf)$ und $\bar{p} = (f, Pf)$ sind reell.

(c) $[Q - \bar{q}, P - \bar{p}] = i\hbar$.

## Aufgabe 34: Hyperfeinstrukturaufspaltung (5 Punkte)

Berechnen Sie die Hyperfeinstrukturaufspaltung in magnetischer Dipolnäherung im Grundzustand des Deuteriumatoms. Vergleichen Sie die Lage der Niveaus mit dem 1s Niveau ohne Hyperfeinstruktur. In wie viele $m_F$ Komponenten können die Zustände aufspalten?
*Hinweis:* $I = 1$, $g_I = 0{,}8574$