Heiko Dumlich, Max Hoffmann 17. Mai 2007

4 Übungsblatt Atom- und Molekülphysik

4.1 (Kommutatoren)

Es sind $\hat{A}, \hat{B}$ und $\hat{C}$ Operatoren und es sind folgende Kommutatoren zu berechnen:

a)

Die Jacobi Identität:

$$\left[\hat{A},\left[\hat{B},\hat{C}\right]\right]+\left[\hat{B},\left[\hat{C},\hat{A}\right]\right]+\left[\hat{C},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=0,$$

wir betrachten die Kommutatoren einzeln:

$$\left[\hat{A},\left[\hat{B},\hat{C}\right]\right]=\left[\hat{A},\left(\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{B}\right)\right]=\hat{A}\left(\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{B}\right)-\left(\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{B}\right)\hat{A}=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{A}\hat{C}\hat{B}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}+\hat{C}\hat{B}\hat{A},$$

$$\left[\hat{B},\left[\hat{C},\hat{A}\right]\right]=\left[\hat{B},\left(\hat{C}\hat{A}-\hat{A}\hat{C}\right)\right]=\hat{B}\left(\hat{C}\hat{A}-\hat{A}\hat{C}\right)-\left(\hat{C}\hat{A}-\hat{A}\hat{C}\right)\hat{B}=\hat{B}\hat{C}\hat{A}-\hat{B}\hat{A}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}\hat{B}+\hat{A}\hat{C}\hat{B},$$

$$\left[\hat{C},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]=\left[\hat{C},\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)\right]=\hat{C}\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)-\left(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right)\hat{C}=\hat{C}\hat{A}\hat{B}-\hat{C}\hat{B}\hat{A}-\hat{A}\hat{B}\hat{C}+\hat{B}\hat{A}\hat{C},$$

fügen wir dies nun in die obige Gleichung ein, folgt:

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{A}\hat{C}\hat{B}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}+\hat{C}\hat{B}\hat{A}+\hat{B}\hat{C}\hat{A}-\hat{B}\hat{A}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}\hat{B}+\hat{A}\hat{C}\hat{B}+\hat{C}\hat{A}\hat{B}-\hat{C}\hat{B}\hat{A}-\hat{A}\hat{B}\hat{C}+\hat{B}\hat{A}\hat{C}=0,$$

da sich die Operatoren Trios gerade aufheben, gilt die Gleichung.

b)

$$\left[\hat{A}^2,\hat{B}\right]=\hat{A}\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{A}$$

Zeigt man in einer Zeile:

$$\left[\hat{A}\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{A}\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\hat{A}=\hat{A}\hat{A}\hat{B}\underbrace{-\hat{A}\hat{B}\hat{A}+\hat{A}\hat{B}\hat{A}}_{=0}-\hat{B}\hat{A}\hat{A}=\hat{A}\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{A}.$$

$\square$

c)

$$\left[L^2, L_z\right] = 0$$

Mit $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ folgt:

$$\left[L^2, L_z\right] = \left[L_x^2, L_z\right] + \left[L_y^2, L_z\right] + \underbrace{\left[L_z^2, L_z\right]}_{=0}$$

Mit den Kommutatoren $[L_i, L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$ folgt:

$$\begin{aligned}
\left[L^2, L_z\right] &= \left[L_x^2, L_z\right] + \left[L_y^2, L_z\right] \\
&= L_x\left[L_x, L_z\right] + \left[L_x, L_z\right]L_x + L_y\left[L_y, L_z\right] + \left[L_y, L_z\right]L_y \\
&= -i\hbar L_xL_y - i\hbar L_yL_x + i\hbar L_yL_x + i\hbar L_xL_y \\
&= 0
\end{aligned}$$

□

d)

$$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z$$

Wir setzen $L_\pm = L_x \pm iL_y$ ein und erhalten, wobei $[L_i, L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$, d.h. also für zwei gleiche Indizes der levi-civita-tensor eine Null liefert:

$$\begin{aligned}
[L_+, L_-] &= [L_x + iL_y, L_x - iL_y] \\
&= -i\left[L_x, L_y\right] + i\left[L_y, L_x\right] \\
&= -i \cdot i\hbar L_z + i \cdot (-i)\,\hbar L_z \\
&= 2\hbar L_z
\end{aligned}$$

□

4.2 (Harmonischer Oszillator)

Es gilt für den harmonischen Oszillator:

$$a^+a\psi_n = -2n\psi_n$$

mit $n = 0, 1, 2, \ldots$

a)

Es ist zu zeigen, dass für quadratintegrierbare ψ und φ gilt:

$$\int \left(a^+\varphi\right)^* \psi \, dy = -\int \varphi^* a\psi \, dy$$

Es gilt $a^+ = \left(\frac{d}{dy} - y\right)$ und $a = \left(\frac{d}{dy} + y\right)$, eingesetzt:

$$\int \left(\left(\frac{d}{dy} - y\right)\varphi\right)^* \psi \, dy = -\int \varphi^* \left(\frac{d}{dy} + y\right) \psi \, dy$$

Partielle Integration liefert:

$$\int \left(\frac{d}{dy}\varphi\right)^* \psi \, dy - \int (y\varphi)^* \psi \, dy = \varphi^*\psi|_{-\infty}^{\infty} - \int \varphi^* \frac{d}{dy}\psi \, dy - \int (y\varphi)^* \psi \, dy$$

Wir können den Randterm wegwerfen und erhalten:

$$\int \left(a^+\varphi\right)^* \psi \, dy = -\int \varphi^* \left(\frac{d}{dy} + y\right) \psi \, dy$$

setzen wir noch a ein folgt:

$$\int \left(a^+\varphi\right)^* \psi \, dy = -\int \varphi^* a\psi \, dy$$

$\square$

b)

Es ist mit Hilfe von a) zu zeigen, dass

$$\int \left(a^+\psi_n\right)^* \left(a^+\psi_n\right) dy = 2\,(n+1) \int \psi_n^* \psi_n \, dy$$

Wir können das Ergebnis aus a) mit $\varphi = \psi_n$ und $\psi = a^+\psi_n$ benutzen:

$$\int \left(a^+\psi_n\right)^* \left(a^+\psi_n\right) dy = -\int {\psi_n}^* a a^+ \psi_n \, dy,$$

mit $a^+a - aa^+ = 2 \Leftrightarrow aa^+ = a^+a - 2$ (s. Skript 7.16) folgt:

$$\int \left(a^+\psi_n\right)^* \left(a^+\psi_n\right) dy = -\int {\psi_n}^* \left(a^+a - 2\right) \psi_n \, dy$$

unter Verwendung von $a^+a\psi_n = -2n\psi_n$ folgt also:

$$\int \left(a^+\psi_n\right)^* \left(a^+\psi_n\right) dy = 2\,(n+1) \int {\psi_n}^* \psi_n \, dy$$

$\square$

c)

Es ist mit Hilfe von b) zu zeigen, dass falls ψ_n normiert ist, also $\int \psi_n^* \psi_n = 1$, auch $\psi_{n+1} = (2)^{-\frac{1}{2}} (n+1)^{-\frac{1}{2}} a^+ \psi_n$ normiert ist. Aus b) erhalten wir mit der Normiertheit von ψ_n:

$$\int \left(a^+ \psi_n\right)^* \left(a^+ \psi_n\right) dy = 2\,(n+1)\,,$$

umgestellt bedeutet das:

$$\int (2)^{-\frac{1}{2}} (n+1)^{-\frac{1}{2}} \left(a^+ \psi_n\right)^* (2)^{-\frac{1}{2}} (n+1)^{-\frac{1}{2}} \left(a^+ \psi_n\right) dy = 1$$

wir identifizieren hier aber sofort ψ_{n+1}^* und ψ_{n+1}, d.h.

$$\int \psi_{n+1}^* \psi_{n+1} dy = 1$$

dies ist aber gerade die Normiertheit für ψ_{n+1}, was zu zeigen war. Somit gilt also nach umstellen der Gleichung für ψ_{n+1}:

$$a^+ \psi_n = (2)^{\frac{1}{2}} (n+1)^{\frac{1}{2}} \psi_{n+1} = \sqrt{2\,(n+1)}\psi_{n+1}$$

$\square$

Analog ist nun zu zeigen, dass

$$a\psi_n = (2)^{\frac{1}{2}} (n)^{\frac{1}{2}} \psi_{n-1}$$

Wir betrachten

$$\int \left(a^+ \varphi\right)^* \psi \, dy = -\int \varphi^* a \psi \, dy,$$

mit $\varphi = a\psi_n$ und $\psi = \psi_n$ folgt:

$$\int \left(a^+ a \psi_n\right)^* \psi_n \, dy = -\int \left(a\psi_n\right)^* \left(a\psi_n\right) \, dy,$$

unter Benutzung von $a^+ a \psi_n = -2n\psi_n$ folgt also:

$$\int \left(a\psi_n\right)^* \left(a\psi_n\right) \, dy = 2n \int {\psi_n}^* \psi_n \, dy,$$

mit der Normiertheit von ψ_n wird dies zu:

$$\int (2)^{-\frac{1}{2}} (n)^{-\frac{1}{2}} \left(a\psi_n\right)^* (2)^{-\frac{1}{2}} (n)^{-\frac{1}{2}} \left(a\psi_n\right) \, dy = 1$$

wir erkennen hierin mit $\psi_{n-1} = (2)^{-\frac{1}{2}} (n)^{-\frac{1}{2}} a\psi_n$ die Normiertheit von ψ_{n-1}.

Alternativ:

Ganz einfach können wir auch die gezeigte Gleichung im ersten Teil $a^+\psi_n = (2)^{\frac{1}{2}}\,(n+1)^{\frac{1}{2}}\,\psi_{n+1}$ mit a von links multiplizieren:

$$\begin{aligned}
aa^+\psi_n &= (2)^{\frac{1}{2}}\,(n+1)^{\frac{1}{2}}\,a\psi_{n+1} \\
\left(a^+a-2\right)\psi_n &= (2)^{\frac{1}{2}}\,(n+1)^{\frac{1}{2}}\,a\psi_{n+1} \\
-2\,(n+1)\,\psi_n &= (2)^{\frac{1}{2}}\,(n+1)^{\frac{1}{2}}\,a\psi_{n+1}
\end{aligned}$$

Setzen wir jetzt $n = n-1$, so folgt:

$$\psi_{n-1} = -\frac{(2)^{\frac{1}{2}}\,(n)^{\frac{1}{2}}}{2n}a\psi_n.$$

Dies ist gleich:

$$\psi_{n-1} = -\,(2)^{-\frac{1}{2}}\,(n)^{-\frac{1}{2}}\,a\psi_n$$

oder umgestellt:

$$a\psi_n = -\,(2)^{\frac{1}{2}}\,(n)^{\frac{1}{2}}\,\psi_{n-1}$$

Da ψ_{n-1} und $-\psi_{n-1}$ den gleichen Zustand beschreiben, folgt:

$$a\psi_n = (2)^{\frac{1}{2}}\,(n)^{\frac{1}{2}}\,\psi_{n-1} = \sqrt{2n}\psi_{n-1}$$

$\square$

d)

Es ist zu zeigen, dass die Übergangswahrscheinlichkeit von $\psi_n \to \psi_m$ ausser für $m = n\pm1$ (Auswahlregel) verschwindet. Für diesen Fall ist zu zeigen, dass folgende Beziehungen gelten:

$$\begin{aligned}
\left|\int \psi_{n+1}^* x\psi_n\,dy\right|^2 &= \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)\frac{(n+1)}{2} \\
\left|\int \psi_{n-1}^* x\psi_n\,dy\right|^2 &= \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)\frac{n}{2}
\end{aligned}$$

Wir betrachten das Matrixelement:

$$\int \psi_m^* x\psi_n\,dy = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\int \psi_m^* y\psi_n\,dy = \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\int \psi_m^*\left(a-a^+\right)\psi_n\,dy.$$

Unter Verwendung von c) können wir schreiben:

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\int\psi_m^*\left(a-a^+\right)\psi_n\,dy &= \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\int\psi_m^*\left(a-a^+\right)\psi_n\,dy \\
&= \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\int\psi_m^*\left(\sqrt{2n}\psi_{n-1}-\sqrt{2\left(n+1\right)}\psi_{n+1}\right)\,dy \\
&= \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sqrt{2n}\int\psi_m^*\psi_{n-1}\,dy-\sqrt{2\left(n+1\right)}\int\psi_m^*\psi_{n+1}\,dy\right)
\end{aligned}
$$

Wir können die Orthonormalitätsrelation $\int\psi_m^*\psi_{m'}\,dy=\delta_{mm'}$ benutzen:

$$\int\psi_m^*x\psi_n\,dy=\frac{1}{2}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\sqrt{2n}\delta_{m,n-1}-\sqrt{2\left(n+1\right)}\delta_{m,n+1}\right).$$

Diese Funktion verschwindet also nur nicht für $m=n\pm1$, wie gefordert. Für die Betragsquadrate der angegebenen "Übergänge" ergibt sich sofort durch einsetzen von $m=n+1$ bzw. $m=n-1$ in die vorangehende Formel und quadrieren:

$$
\begin{aligned}
\left|\int\psi_{n-1}^*x\psi_n\,dy\right|^2=\frac{1}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)\left(\sqrt{2n}\cdot1-0\right)^2 &= \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)\frac{n}{2} \\
\left|\int\psi_{n+1}^*x\psi_n\,dy\right|^2=\frac{1}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)\left(0-\sqrt{2\left(n+1\right)}\cdot1\right)^2 &= \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)\frac{n+1}{2}
\end{aligned}
$$

□

4.3 (Electron in a box)

We got a particle in a box, which exerts a force on the walls.

a)

We are meant to find an expression for the force F, for an electron in a 1-dimensional box, while when the length of the box changes by dL the energy changes by $dE=-FdL$. We can rearrange the equation to finde the force F:

$$-\frac{dE}{dL}=F$$

Now we only need to use the energie for the particle in the box. We can use (4.14) (script), while our boxes a is $\frac{L}{2}$ or we can say the box reaches from $x_1=-\frac{L}{2}$ to $x_2=\frac{L}{2}$. Therefore we receive a energie of:

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{8m_e\left(\frac{L}{2}\right)^2}=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2m_eL^2}.$$

We now only need to differentiate (to L), add a minus and we have F, so we get:

$$F=-\frac{dE}{dL}=-\left(-2\right)\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2m_eL^3}=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{m_eL^3}.$$

b)

Well, easy job now, we only need to find out what L will be for $n = 1$ and $F = 1\,N$. That's just inserting some numbers and rearranging our equation for F:

$$L = \sqrt[3]{\frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{m_e F}}$$

Now we can insert the numbers:

$$L = 4,94 \cdot 10^{-13}\,m = 494\,fm.$$

This means the force will reach $F = 1\,N$ for the length $L = 4,94 \cdot 10^{-13}\,m$, which is a really small number, while the atom radius is about Å, which is $10^{-10}\,m$, so we cannot really say that the force will be like this in real world, while the theory used is not taking into account forces acting only on this small distances, which may influence the whole setting.