Heiko Dumlich, Max Hoffmann 7.6.2007

7-1. Aufgabe

Aus der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \partial_t |\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

erhält man

$$\partial_t |\psi\rangle = \frac{\hat{H}}{i\hbar}|\psi\rangle .$$

Wir bilden die adjungierte Gleichung

$$\left(\partial_t|\psi\rangle\right)^\dagger = \left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}|\psi\rangle\right)^\dagger$$

$$\Leftrightarrow \quad \partial_t \langle\psi| = \frac{1}{-i\hbar}(|\psi\rangle)^\dagger \hat{H}^\dagger$$

$$= \frac{-1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H} .$$

Jetzt leiten wir den Erwartungswert $\langle u\rangle$ nach der Zeit ab:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{u}\rangle = \frac{d}{dt}\langle\psi|\hat{u}|\psi\rangle = \left(\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi|\right)u|\psi\rangle + \langle\psi|u\left(\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle\right)$$

$$+ \langle\psi|\frac{\partial u}{\partial t}|\psi\rangle$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{H}\hat{u}|\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\hat{u}\hat{H}|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial\hat{u}}{\partial t}|\psi\rangle$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{u},\hat{H}]\rangle + \langle\frac{\partial\hat{u}}{\partial t}\rangle$$

7.2

Es ist die Länge des Übergangsdipolmomentes für den $2p_z \to 2s$ Übergang zu bestimmen, wobei $|\vec{\mu}| = e \cdot d$ gelten soll mit der Länge d.

Für das Übergangsdipolmoment gilt:

$$\vec{\mu}_{mi} = -e \int \psi_m^* \, \vec{r} \, \psi_i \, dV \quad (9.111)$$

Wobei $i = 2p_z$ und $m = 2s$ und $Z = 2$ gelten sollen. Das heisst für die Zustände: $2p_z \to \psi_{210}$ (vgl. 7.23) bzw. $2s \to \psi_{200}$.

Die Wellenfunktionen ergeben sich als:

$$\psi_{210}^* = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

$$\psi_{200} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \cdot 2 \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

Einsetzen von $Z=2$ und umformen:

$$\psi_{210}^* = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^5}} \cos\theta \, r \, e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{a_0}}$$

Es gilt in Kugelkoordinaten: $\vec{r} = \begin{pmatrix} r\cos\varphi\sin\theta \\ r\sin\varphi\sin\theta \\ r\cos\theta \end{pmatrix}$,

d.h. wir können nun die x,y,z-Komponente von $\vec{\mu}_{mi}$ berechnen:

x:

$$(\vec{\mu}_{mi})_x = -e \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{\infty} dr \, r^2 \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^5}} \cos\theta \, r \, e^{-\frac{r}{a_0}} \, r\cos\varphi\sin\theta \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{a_0}},$$

Wir sehen, dass die θ-Integration verschwindet, da: (oder Substitution $x = \sin\theta$)

$$\frac{d}{d\theta} \sin^3\theta = 3\sin^2\theta\cos\theta \Leftrightarrow \int_0^{\pi} \sin^2\theta\cos\theta = \left[\frac{\sin^3\theta}{3}\right]_0^{\pi} = 0 \quad \checkmark$$

d.h. aber auch, dass die x-Komponente von $\vec{\mu}_{mi}$ verschwindet.

y:

$$(\vec{\mu}_{mi})_y = \frac{-e}{\pi a_0^4} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{\infty} dr \, r^2 \cos\theta \, r \, e^{-\frac{r}{a_0}} \, r\sin\varphi\sin\theta \left(1 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{a_0}},$$

verschwindet auch, da hier dieselben Terme mit θ-Abhängigkeit integriert werden.

z:

$$(\vec{\mu}_{mi})_z = \frac{-e}{\pi a_0^4} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{\infty} dr \, r^2 \cos\theta \, r \, e^{-\frac{r}{a_0}} \, r\cos\theta \left(1 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$= \frac{-e}{\pi a_0^4} 2\pi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta\cos^2\theta \int_0^{\infty} dr \, r^4 \left(1 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

7.2

$$(\vec{\mu}_{mi})_z = \frac{-2e}{a_0^4}\left[-\frac{1}{3}\cos^3\theta\right]_0^\pi \int_0^\infty dr \left(r^4 e^{-\frac{2r}{a_0}} - \frac{r^5}{a_0} e^{-\frac{2r}{a_0}}\right),$$

da $\frac{d}{d\theta}\left(-\frac{1}{3}\cos^3\theta\right) = \cos^2\theta\sin\theta$.

$$(\vec{\mu}_{mi})_z = -\frac{2e}{a_0^4}\,\frac{2}{3}\int_0^\infty dr\left(r^4 e^{-\frac{2r}{a_0}} - \frac{r^5}{a_0} e^{-\frac{2r}{a_0}}\right),$$

Die Integration über r können wir durch mehrmaliges partielles integrieren lösen:

$$\frac{1}{a_0}\int dr\, r^5 e^{-\frac{2r}{a_0}} = \frac{1}{a_0}\left(\underbrace{\left[r^5\left(-\frac{a_0}{2}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}}\right]_0^\infty}_{=0} + \frac{5a_0}{2}\int_0^\infty dr\, r^4 e^{-\frac{2r}{a_0}}\right) = \frac{5}{2}\int_0^\infty dr\, r^4 e^{-\frac{2r}{a_0}},$$

somit erhalten wir:

$$(\vec{\mu}_{mi})_z = \frac{2e}{a_0^4}\,\frac{\cancel{2}}{\cancel{3}}\cdot\frac{\cancel{3}}{\cancel{2}}\int_0^\infty dr\, r^4 e^{-\frac{2r}{a_0}},$$

wobei nun nur noch ein paar Mal p.I't werden muss: (die Randterme schreiben wir gar nicht erst auf, da sie 0 liefern, s.o.)

$$(\vec{\mu}_{mi})_z = \frac{2e}{a_0^4}\, 2a_0 \int_0^\infty dr\, r^3 e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$= \frac{4e}{a_0^3}\,\frac{3}{2}a_0\int_0^\infty dr\, r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} = \frac{6e}{a_0^2}\frac{\cancel{2}a_0}{\cancel{2}}\int_0^\infty dr\, r\, e^{-\frac{2r}{a_0}} = \frac{6e}{a_0}\,\frac{a_0}{2}\int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$= 3e\cdot\left[-\frac{a_0}{2}e^{-\frac{2r}{a_0}}\right]_0^\infty = \frac{3e}{2}a_0$$

Das heisst, der Abstand d: $|\vec{\mu}| = e\cdot d$, beträgt:

$$d = \frac{3}{2}a_0 \approx 7{,}94\cdot 10^{-11}\,m \approx 0{,}8\,Å.$$

Das Übergangsdipolmoment besitzt also nur eine z-Komponente, während x- und y-Komponente verschwinden!

$$\vec{\mu}_{mi} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{3e}{2}a_0 \end{pmatrix}.$$

7-3

a) Zeige: $(\vec{k}\cdot\vec{r})(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{p}) = \frac{1}{2}\left[(\vec{k}\cdot\vec{r})(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{p}) + (\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r})(\vec{k}\cdot\vec{p})\right]$

$$+ \frac{1}{2}\left[(\vec{k}\times\vec{\varepsilon})\cdot(\vec{r}\times\vec{p})\right]$$

Wir rechnen von der rechten Seite komponentenweise:

$$(\vec{k}\cdot\vec{r})(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{p}) + (\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r})(\vec{k}\cdot\vec{p}) + (\vec{k}\times\vec{\varepsilon})\cdot(\vec{r}\times\vec{p})$$

$$\Rightarrow k_\alpha r_\alpha \varepsilon_\beta p_\beta + \varepsilon_\alpha r_\alpha k_\beta p_\beta + k_\alpha \varepsilon_\beta \vec{e}_\gamma \cdot \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\, r_\mu p_\nu \vec{e}_\omega\, \varepsilon_{\mu\nu\omega}$$

$$= \quad '' \quad + k_\alpha \varepsilon_\beta\, \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\, r_\mu p_\nu\, \varepsilon_{\mu\nu\omega} \underbrace{\vec{e}_\gamma \cdot \vec{e}_\omega}_{=\delta_{\gamma\omega}}$$

$$= \quad '' \quad + k_\alpha \varepsilon_\beta r_\mu p_\nu\, \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\gamma\mu\nu} \quad [\text{Grassmann-Id.}]$$

$$= \quad '' \quad + k_\alpha \varepsilon_\beta r_\mu p_\nu (\delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\nu} - \delta_{\alpha\nu}\delta_{\beta\mu})$$

$$= k_\alpha r_\alpha \varepsilon_\beta p_\beta + \cancel{\varepsilon_\alpha r_\alpha k_\beta p_\beta} + k_\alpha r_\alpha \varepsilon_\beta p_\beta - \cancel{k_\alpha p_\alpha \varepsilon_\beta r_\beta}$$

$$\Rightarrow 2(\vec{k}\cdot\vec{r})(\vec{\varepsilon}\cdot\vec{p})$$

$\square$

7.3

b)

Der Term $\hat{A} = \frac{1}{2}\left[(\hat{\vec k}\cdot\hat{\vec r})(\vec\varepsilon\cdot\hat{\vec p}) + (\vec\varepsilon\cdot\hat{\vec r})(k\cdot\hat{\vec p})\right]$

erzeugt ein Matrixelement:

$$\langle\psi_m|\hat A|\psi_k\rangle = \frac12\langle\psi_m|\, k_\alpha \hat r_\alpha \varepsilon_\beta \hat p_\beta + \varepsilon_\beta \hat r_\beta k_\alpha p_\alpha\,|\psi_k\rangle ,$$

wir können $k_\alpha\varepsilon_\beta$ aus dem Erwartungswert ziehen (Parameter), zudem gilt:

$$[\hat r_\alpha, \hat p_\beta] = -\frac{\hbar}{i}\delta_{\alpha\beta} = \hat r_\alpha\hat p_\beta - \hat p_\beta \hat r_\alpha \Leftrightarrow \hat r_\alpha \hat p_\beta = \hat p_\beta \hat r_\alpha - \frac{\hbar}{i}\delta_{\alpha\beta}$$

$$\Rightarrow \langle\psi_m|\hat A|\psi_k\rangle = \frac12 k_\alpha\varepsilon_\beta \langle\psi_m|\,\hat p_\beta \hat r_\alpha - \frac{\hbar}{i}\delta_{\alpha\beta} + \hat r_\beta \hat p_\alpha\,|\psi_k\rangle ,$$

mit (*) $k_\alpha\varepsilon_\beta\delta_{\alpha\beta} = k_\alpha\varepsilon_\alpha = \vec k\cdot\hat\varepsilon$ und $\vec k\cdot\hat\varepsilon = 0$, bleibt nur folgender Term:

$$\langle\psi_m|\hat A|\psi_k\rangle = \frac12\langle\psi_m|(\vec\varepsilon\cdot\hat{\vec p})(\vec k\cdot\hat{\vec r}) + (\vec\varepsilon\cdot\hat{\vec r})(\vec k\cdot\hat{\vec p})|\psi_k\rangle ,$$

wir nutzen $\hat{\vec p} = \frac{im}{\hbar}[\hat H_0, \hat{\vec r}] = \frac{im}{\hbar}(\hat H_0\hat{\vec r} - \hat{\vec r}\hat H_0)$:

$$\langle\psi_m|\hat A|\psi_k\rangle = \frac{im}{2\hbar}\langle\psi_m|\big(H_0\,\hat{\vec r}\cdot\vec\varepsilon\;\vec k\cdot\vec r - \cancel{(\vec\varepsilon\cdot\hat{\vec r}\,H_0)(\vec k\cdot\hat{\vec r})) + (\vec\varepsilon\cdot\hat{\vec r})(\vec k\cdot H_0\hat{\vec r}} - \vec k\cdot\hat{\vec r}\hat H_0\big)|\psi_k\rangle$$

$$= \frac{im}{2\hbar}\langle\psi_m|\,E_m(\hat{\vec r}\cdot\vec\varepsilon)(\vec k\cdot\hat{\vec r}) - (\vec\varepsilon\cdot\hat{\vec r})(\vec k\cdot\hat{\vec r})E_k\,|\psi_k\rangle$$

$$= \frac{im\omega_{mk}}{2}\langle\psi_m|(\vec\varepsilon\cdot\hat{\vec r})(\vec k\cdot\hat{\vec r})|\psi_k\rangle$$

Der Operator führt auch Komponenten: (Einsteinsche Summenkonvention auf den ganzen Blättern gültig!)

$$\varepsilon_\alpha \hat r_\alpha k_\beta \hat r_\beta = \varepsilon_\alpha\hat r_\alpha k_\beta \hat r_\beta - \underbrace{\frac13 \varepsilon_\alpha k_\beta r_\alpha r_\beta\delta_{\alpha\beta}}_{=0\text{, wegen } (*) \text{ s.o.}}$$

Führt man die Summe aus, so folgt aus

$$\langle\psi_m|\hat A|\psi_k\rangle = \sum_{\alpha,\beta}\frac{im\omega_{mk}}{2}\langle\psi_m|\,\varepsilon_\alpha k_\beta \hat r_\alpha \hat r_\beta - \frac13\varepsilon_\alpha k_\beta r_\alpha r_\beta\delta_{\alpha\beta}\,|\psi_k\rangle$$

$$= \sum_{\alpha,\beta}\frac{im\omega_{mk}}{6}\langle\psi_m|\,\varepsilon_\alpha k_\beta\big(3\hat r_\alpha\hat r_\beta - \underbrace{\hat r_\alpha \hat r_\beta\delta_{\alpha\beta}}_{=r^2\delta_{\alpha\beta}}\big)|\psi_k\rangle$$

das Quadrupolübergangsmoment:

$$Q_{ij}^{fm} = -e\int\psi_f^*(3x_ix_j - r^2\delta_{ij})\psi_m\,d\vec r.$$

7.3

c) Wir nutzen Kugelkoordinaten und drücken die Komponenten durch Kugelflächenfunktionen aus:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi = r\sin\theta\frac{(e^{i\varphi}+e^{-i\varphi})}{2} \propto r\left(Y_{1-1}-Y_{11}\right) \qquad (7.226)$$
$$y = r\sin\theta\sin\varphi = r\sin\theta\frac{1}{2i}(e^{i\varphi}-e^{-i\varphi}) \propto ir\left(Y_{1-1}+Y_{11}\right) \qquad (7.228)$$
$$z = r\cos\theta = r\,Y_{10} \qquad (7.230)$$

da wir Auswahlregeln bestimmen möchten benötigen wir die Faktoren nicht. Da wir verschiedene Komponenten multiplizieren werden, macht es Sinn sich einige Term-Beziehungen der Kugelflächenfunktionen abzuleiten:

$$Y^2_{1\pm1} \propto \sin^2\theta\, e^{\pm 2i\varphi} \propto Y_{2\pm2}$$
$$Y_{10}Y_{1\pm1} \propto \cos\theta\sin\theta\, e^{\pm i\varphi} \propto Y_{2\pm1}$$
$$Y_{11}Y_{1-1} \propto \sin^2\theta = (1-\cos^2\theta) \propto Y_{20} + \text{const.}$$
$$Y^2_{10} \propto \cos^2\theta \propto Y_{20} + \text{const.}$$

Für die gemischten Terme gilt $\delta_{ij}=0$, d.h. nur für x^2, y^2, z^2 verschwindet der zweite Term des Quadrupolmomentes nicht, jedoch wird das Quadrupolmoment auch nicht 0 für den Fall $i=j$, so dass er für die Betrachtung der Auswahlregeln vernachlässigt werden **kann**. Wir betrachten also nur den Term $\langle x_i x_j\rangle$:

$$\langle x^2\rangle \propto \int dr \int d\Omega\, Y^*_{lm}\left(Y_{1-1}-Y_{11}\right)^2 Y_{l'm'} = \iint dr\,d\Omega\, Y^*_{lm}\left(Y_{2-2}-2Y_{20}-2\,\text{const.}+Y_{22}\right)Y_{l'm'}$$
$$= \iint dr\,d\Omega\left(Y^*_{lm}Y_{2-2}Y_{l'm'} - 2Y^*_{lm}Y_{20}Y_{l'm'} - 2\delta_{ll'}\delta_{mm'} + Y^*_{lm}Y_{22}Y_{l'm'}\right),$$

wir nutzen, dass das Produkt von zwei Kugelflächenfunktionen als Summe (äquivalent zu 9.124) geschrieben werden kann:

$$Y_{l,m}\,Y_{l_m,m_{l_m}} = \sum_{a=-l}^{l} c_a\, Y_{l_m+a,\,m_{l_m}+m},$$

Jetzt können wir Einsetzen und die Orthonormalität ausnutzen:

$$\langle x^2\rangle \propto \iint dr\,d\Omega\left(Y^*_{lm}\sum_{a=-2}^{2}c_a Y_{l'+a,m'-2} - 2\,Y^*_{lm}\sum_{a=-2}^{2}c_a Y_{l'+a,m'} - 2\delta_{ll'}\delta_{mm'} + Y^*_{lm}\sum_{a=-2}^{2}Y_{l'+a,m'+2}\right)$$

Das Integral verschwindet also nicht für: (wegen den deltaKronecker) die aus der Orthonormalität folgen)

$$\left.\begin{array}{lll} m = m'-2 \Leftrightarrow & m-m' = \Delta m = -2 \\ m = m' \Leftrightarrow & m-m' = \Delta m = 0 \\ m = m'+2 \Leftrightarrow & m-m' = \Delta m = +2 \end{array}\right\} \Delta m = 0, \pm 2$$

$$\left.\begin{array}{lll} l = l'-2 & \Leftrightarrow & \Delta l = -2 \\ l = l'-1 & \Leftrightarrow & \Delta l = -1 \\ l = l' & \Leftrightarrow & \Delta l = 0 \\ l = l'+1 & \Leftrightarrow & \Delta l = 1 \\ l = l'+2 & \Leftrightarrow & \Delta l = 2 \end{array}\right\} \Delta l = 0, \pm 1, \pm 2$$

7.3

c) (ab jetzt können wir die Berechnung von $\langle x^2 \rangle$ benutzen, um die Auswahlregeln der äquivalenten Y_{lm} schnell zu bestimmen!)

$$\langle y^2 \rangle \propto \int d\Omega\, Y_{lm}^* \left(Y_{1-1} + Y_{11} \right)^2 Y_{l'm'} = \int d\Omega\, Y_{lm}^* \left(Y_{2-2} + 2 Y_{20} + 2\,\mathrm{const.} + Y_{22} \right) Y_{l'm'};$$

Auswahlregeln sind äquivalent zu $\langle x^2 \rangle$: $\Delta m = 0, \pm 2$; $\Delta l = 0, \pm 1, \pm 2$.

$$\langle z^2 \rangle \propto \int d\Omega\, Y_{lm}^* Y_{10}^2 Y_{l'm'} = \int d\Omega\, Y_{lm}^* \left(Y_{20} + \mathrm{const.} \right) Y_{l'm'}$$

$\Rightarrow \quad \Delta m = 0 \;;\; \Delta l = 0, \pm 1, \pm 2$

$$\langle xy \rangle = \langle yx \rangle \propto \int d\Omega\, Y_{lm}^* \left(Y_{1-1} - Y_{11} \right) \cdot \left(Y_{1-1} + Y_{11} \right) Y_{l'm'} = \int d\Omega\, Y_{lm}^* \left(Y_{2-2} - Y_{22} \right)$$

$\Rightarrow \quad \Delta m = \pm 2 \;;\; \Delta l = 0, \pm 1, \pm 2$

$$\langle xz \rangle = \langle zx \rangle \propto \int d\Omega\, Y_{lm}^* \left(Y_{1-1} - Y_{11} \right) Y_{10} Y_{l'm'} = \int d\Omega\, Y_{lm}^* \left(Y_{2-1} - Y_{21} \right) Y_{l'm'}$$

$$= \int d\Omega\, Y_{lm}^* \left(\sum_{a=-2}^{2} c_a Y_{l'+a,\, m'-1} - \sum_{a=-2}^{2} c_a Y_{l'+a,\, m'+1} \right)$$

$$\propto \sum_{a=-2}^{2} c_a \delta_{l,\, l'+a}\, \delta_{m,\, m'-1} - \sum_{a=-2}^{2} c_a \delta_{l,\, l'+a}\, \delta_{m,\, m'+1}$$

$$\Rightarrow \left. \begin{array}{l} m = m' - 1 \;\Leftrightarrow\; m - m' = \Delta m = -1 \\ m = m' + 1 \;\Leftrightarrow\; m - m' = \Delta m = +1 \end{array} \right\} \Delta m = \pm 1$$

$\Delta l = 0, \pm 1, \pm 2$

Zu guter Letzt:

$$\langle yz \rangle = \langle zy \rangle \propto \int d\Omega\, Y_{lm}^* \left(Y_{1-1} + Y_{11} \right) Y_{10} Y_{l'm'} = \int d\Omega\, Y_{lm}^* \left(Y_{2-1} + Y_{21} \right) Y_{l'm'}$$

Auswahlregeln sind äquivalent zu $\langle xy \rangle$: $\Delta m = \pm 2$; $\Delta l = 0, \pm 1, \pm 2$.

Insgesamt ergibt sich also für die Auswahlregeln:

$\Delta m = 0, \pm 1, \pm 2$

$\Delta l = 0, \pm 1, \pm 2$

7.3

d)

Magnetische Dipolübergänge $\frac{1}{2}(\vec{k}\times\hat{\varepsilon})\cdot(\vec{r}\times\vec{p})$, mit $(\vec{k}\times\hat{\varepsilon})\propto\vec{B}$ und $(\vec{r}\times\vec{p})\propto\vec{L}$

d.h. $\propto\frac{1}{2}\vec{B}\cdot\vec{L}$, es gelten: $L_x=\frac{1}{2}(L_++L_-)$ und $L_y=\frac{i}{2}(L_--L_+)$

$$\Rightarrow \quad \langle nlm|\vec{B}\cdot\vec{L}|n'l'm'\rangle=\langle nlm|B_xL_x+B_yL_y+B_zL_z|n'l'm'\rangle$$
$$=\langle nlm|B_x\tfrac{1}{2}(L_++L_-)+B_y\tfrac{i}{2}(L_--L_+)+B_zL_z|n'l'm'\rangle,$$

Es gilt für die Eigenwerte der Operatoren $L_z|n,l,m\rangle=m\hbar|nlm\rangle$ und $L_\pm|nlm\rangle=\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}\,|n\,l\,m\pm1\rangle$, wobei für die Auswahlregeln die Faktoren irrelevant sind, es folgt hiermit:

$$\langle nlm|(\vec{k}\times\hat{\varepsilon})(\vec{r}\times\vec{p})|n'l'm'\rangle\propto B_x\big(\langle nlm|n'l'm'+1\rangle+\langle nlm|n'l'm'-1\rangle\big)$$
$$+B_y\big(\langle nlm|n'l'm'-1\rangle-\langle nlm|n'l'm'+1\rangle\big)$$
$$+B_z\big(\langle nlm|n'l'm'\rangle\big),$$

hieraus folgen mit der Orthogonalität $\langle nlm|n'l'm'\rangle=\delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'}$ die Auswahlregeln:

$\Delta m=0,\pm1$ und $\Delta l=0$.

7-4

Für das Skalarprodukt, mit eingeschlossenem Winkel α gilt

$$\frac{\vec{a}\cdot\vec{b}}{|\vec{a}|\cdot|\vec{b}|} = \cos\alpha$$

$$\Rightarrow \frac{|\vec{a}\cdot\vec{b}|^2}{|\vec{a}|^2\cdot|\vec{b}|^2} = \cos^2\alpha,$$

Weil $\hat{\varepsilon} = (0,0,1)$ gilt $\alpha = \vartheta$ und mit Normierung folgt

$$\vec{\varkappa} = \frac{\int d\Omega \cos^2\vartheta}{\int d\Omega} = \frac{\int_0^{\pi} d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin\vartheta \cos^2\vartheta}{\int d\vartheta \int d\varphi \sin\vartheta}$$

Mit Substitution $x = \cos\vartheta \Rightarrow dx = -\sin\vartheta\, d\vartheta$

$\cos 0 = 1, \cos\pi = -1$

folgt:

$$\vec{\varkappa} = \frac{2\pi \int_{-1}^{1} dx\, x^2}{2\,4\pi} = \frac{1}{2}\left[\frac{x^3}{3}\right]_{-1}^{1} = \frac{1}{3}$$