Lösungsvorschlag zum Übungsblatt Nr.11

Aufgabe 31

$$\boldsymbol{\nabla}_\lambda \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \langle \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_m | \psi_n \rangle + \langle \psi_m | \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n \rangle = 0\,. \tag{1}$$

Gerade dies können wir verwenden, um die nächste Ableitung zu berechnen:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\nabla}_\lambda \langle \psi_m | H | \psi_n \rangle &= \langle \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_m | H | \psi_n \rangle + \langle \psi_m | \boldsymbol{\nabla}_\lambda H | \psi_n \rangle + \langle \psi_m | H | \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n \rangle = \\ &= E_n \langle \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_m | \psi_n + E_m \langle \psi_m | \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n \rangle + \langle \psi_m | \boldsymbol{\nabla}_\lambda H | \psi_n \rangle = \boldsymbol{\nabla}_\lambda E_n \delta_{nm}\,.\end{aligned} \tag{2}$$

Für $n \neq m$ fällt auf der rechten Seite das Kronecker-Delta weg und wir erhalten:

$$(E_m - E_n) \langle \psi_m | \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n \rangle + \langle \psi_m | \boldsymbol{\nabla}_\lambda H | \psi_n \rangle = 0\,, \tag{3}$$

bzw umgestellt für dies zur Epstein-Formel:

$$\boxed{\langle \psi_m | \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n \rangle = \frac{\langle \psi_m | \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n \rangle}{E_n - E_m}\,.} \tag{4}$$

Für $n = m$ trägt das Kronecker-Delta auf der rechten Seite bei und wir erhalten das Hellmann-Feynman-Theorem:

$$\boxed{\langle \psi_n | \boldsymbol{\nabla}_\lambda H | \psi_n \rangle = \boldsymbol{\nabla}_\lambda E_n\,.} \tag{5}$$

Aufgabe 32

a.)

Wir berechnen eine einzige Komponente, von $\mathbf{Q}_n$, indem wir das Kreuzprodukt mit dem ε-Tensor schreiben:

$$\begin{aligned}(Q_n)_k &= \varepsilon_{ijk} \nabla_{\lambda_i} (C_n)_j = \varepsilon_{ijk} \nabla_{\lambda_i} \mathrm{Im}\left[\langle \psi_n | \nabla_{\lambda_j} \psi_n \rangle\right] = \varepsilon_{ijk} \mathrm{Im}\left[\nabla_{\lambda_i} \sum_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \nabla_{\lambda_j} \psi_n \rangle\right] = \\ &= \varepsilon_{ijk} \mathrm{Im}\left[\sum_m \langle \nabla_{\lambda_i} \psi_n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \nabla_{\lambda_j} \psi_n \rangle + \sum_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \nabla_{\lambda_i} \nabla_{\lambda_j} \psi_n \rangle\right]\,.\end{aligned} \tag{6}$$

Der zweite Term verschwindet, weil er ein Produkt aus einem symmetrischen und antisymmetrischen Anteil (ε-Tensor!) in i und j ist. Die Produktregel wirkt nicht auf den konstanten Einsoperator $\mathbb{1} = \sum_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m|$, den wir eingeschoben haben. Damit gilt weiterhin

$$(Q_n)_k = \mathrm{Im}\left[\sum_m \varepsilon_{ijk} \langle \nabla_{\lambda_i} \psi_n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \nabla_{\lambda_j} \psi_n \rangle\right]\,, \tag{7}$$

und somit:

$$\boxed{\mathbf{Q}_n = \mathrm{Im}\left[\sum_m \langle \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n | \psi_m \rangle \times \langle \psi_m | \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n \rangle\right]\,.} \tag{8}$$

b.)

Aus

$$\boldsymbol{\nabla}_\lambda \langle \psi_n | \psi_n \rangle = \langle \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n | \psi_n \rangle + \langle \psi_n | \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n \rangle = 0\,, \tag{9}$$

also

$$\langle \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n | \psi_n \rangle = -\langle \psi_n | \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n \rangle\,, \tag{10}$$

folgt, wenn wir den Term mit $m = n$ betrachten:

$$\mathrm{Im}\left[\langle \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n | \psi_n \rangle \times \langle \psi_n | \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n \rangle\right] = -\mathrm{Im}\left[\langle \psi_n | \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n \rangle \times \langle \psi_n | \boldsymbol{\nabla}_\lambda \psi_n \rangle\right] = \boxed{0\,.} \tag{11}$$

c.)

Mit Hilfe der Epstein-Formel

$$\langle\psi_m|\boldsymbol{\nabla}_\lambda\psi_n\rangle = \frac{\langle\psi_m|\boldsymbol{\nabla}_\lambda H|\psi_n\rangle}{E_n - E_m}\,, \tag{12}$$

ihr komplex Konjugiertes

$$\langle\boldsymbol{\nabla}_\lambda\psi_n|\psi_m\rangle = \frac{\langle\psi_n|\boldsymbol{\nabla}_\lambda H|\psi_m\rangle}{E_n - E_m}\,, \tag{13}$$

und dem Ergebnis aus Aufgabenteil (b) ergibt sich:

$$\boxed{\mathbf{Q}_n = \mathrm{Im}\left[\sum_{m\neq n}\frac{\langle\psi_n|\boldsymbol{\nabla}_\lambda H|\psi_m\rangle\times\langle\psi_m|\boldsymbol{\nabla}_\lambda H|\psi_n\rangle}{(E_n - E_m)^2}\right]\,.} \tag{14}$$

Aufgabe 33

a.)

Im Allgemeinen gilt

$$\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}) = \begin{pmatrix}\partial/\partial B_x\\ \partial/\partial B_y\\ \partial/\partial B_z\end{pmatrix}(\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z) = \begin{pmatrix}\sigma_x\\ \sigma_y\\ \sigma_z\end{pmatrix} = \boldsymbol{\sigma}\,. \tag{15}$$

Wir führen eine passive Drehung des Koordinatensystems durch, so dass $\mathbf{B}$ in Richtung der z-Achse zeigt und erhalten damit:

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B} = |\mathbf{B}|\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{e}_B = B\sigma_z\,, \tag{16}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}) = \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}B(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{e}_B) = (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{e}_B)\frac{\mathbf{B}}{B} = (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{e}_B)\mathbf{e}_B = \sigma_z\mathbf{e}_B\,. \tag{17}$$

Wir berechnen nun zunächst $\mathbf{Q}_n$ mittels der direkten Formel (14). Dazu benötigen wir die Energiedifferenz zum Quadrat für $n \neq m$:

$$(E_n(\mathbf{B}) - E_m(\mathbf{B}))^2 = (2\hbar\mu_\mathrm{e}B)^2 = 4\hbar^2\mu_\mathrm{e}^2B^2\,. \tag{18}$$

Weiterhin gilt:

$$\begin{aligned}(Q_n)_k &= \frac{1}{4B^2}\mathrm{Im}\left[\sum_m(\langle\psi_n|\boldsymbol{\sigma}|\psi_m\rangle\times\langle\psi_m|\boldsymbol{\sigma}|\psi_n\rangle)_k\right] = \frac{1}{4B^2}\mathrm{Im}\left[\sum_m\varepsilon_{ijk}\langle\psi_n|\sigma_i|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\sigma_j|\psi_n\rangle\right] =\\ &= \frac{1}{4B^2}\mathrm{Im}\left[\varepsilon_{ijk}\langle\psi_n|\sigma_i\sigma_j|\psi_n\rangle\right] = \frac{1}{4B^2}\mathrm{Im}\left[\frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\langle\psi_n|[\sigma_i,\sigma_j]|\psi_n\rangle + \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\langle\psi_n|\{\sigma_i,\sigma_j\}|\psi_n\rangle\right] =\\ &= \frac{1}{4B^2}\mathrm{Im}\left[\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijl}\langle\psi_n|\mathrm{i}\sigma_l|\psi_n\rangle\right] = \frac{1}{2B^2}\mathrm{Im}[\langle\psi_n|\mathrm{i}\delta_{kl}\sigma_l|\psi_n\rangle] = \frac{1}{2B^2}\langle\psi_n|\sigma_k|\psi_n\rangle\,,\end{aligned} \tag{19}$$

und in Vektorschreibweise

$$\mathbf{Q}_n = \frac{1}{2B^2}\langle\psi_n|\boldsymbol{\sigma}|\psi_n\rangle = \frac{\mathbf{e}_B}{2B^2}\langle\psi_n|\sigma_z|\psi_n\rangle = \pm\frac{\mathbf{e}_B}{2B^2}\,. \tag{20}$$

Der $\mathbf{B}$-Feld-Vektor bewegt sich entlang einer geschlossenen Kurve $\mathcal{C}$. Mittels des Stokesschen Theorems kann das Integral längs der Kurve in ein Integral über die Fläche, welche diese Kurve umrandet, umgewandelt werden. Dabei wird $B = |\mathbf{B}|$ als radiale Variable benutzt; $\mathrm{d}\Omega$ sei der Winkelanteil. Damit können wir schreiben:

$$\gamma_\pm(\mathcal{C}) = \int_\mathcal{S}\mathbf{Q}_\pm(\mathbf{B})\,\mathrm{d}\mathbf{f} = \int_\mathcal{S}\mathbf{Q}_\pm(\mathbf{B})\cdot\mathbf{e}_B B^2\,\mathrm{d}\Omega = \pm\frac{1}{2}\int_\mathcal{S}\mathrm{d}\Omega = \boxed{\pm\frac{\Omega}{2}}\,. \tag{21}$$

Das letztere gilt, wenn die eingeschlossene Fläche zu einer Kugel deformiert wird.

b.)

Mittels und

$$\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}|\psi_-\rangle = \frac{\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\vartheta}{2}\cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)|+\rangle - \mathrm{i}(\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\phi)\exp(\mathrm{i}\phi)\cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)|-\rangle + \frac{\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\vartheta}{2}\exp(\mathrm{i}\phi)\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)|-\rangle\,, \tag{22}$$

ergibt sich:

$$\langle\psi_+|\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\psi_+\rangle = \left\{\cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\langle+| + \exp(-\mathrm{i}\phi)\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\langle-|\right\}|\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\psi_+\rangle = \mathrm{i}(\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\phi)\sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\,, \tag{23}$$

$$\begin{aligned}\langle\psi_-|\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\psi_-\rangle &= \left\{\sin\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\langle+| - \exp(-\mathrm{i}\phi)\cos\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\langle-|\right\}|\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\psi_-\rangle = \mathrm{i}(\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\phi)\cos^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) = \\ &= \mathrm{i}(\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\phi)\left\{1-\sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\right\}\,.\end{aligned} \tag{24}$$

Da die Berry-Phase bis auf modulo 2π unbestimmt ist, können wir bei $\langle\psi_-|\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\psi_-\rangle$ die zusätzliche 1 (die bei der Integration nur zu 2π führen würde) weglassen und erhalten:

$$\begin{aligned}\gamma_\pm &= \oint_{\mathcal{C}}\mathrm{Im}(\langle\psi_\pm|\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\psi_\pm\rangle) = \pm\oint_{\mathcal{C}}(\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\phi)\sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) = \pm\sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right)\oint_{\mathcal{C}}(\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{B}}\phi)\,\mathrm{d}\mathbf{B} = \\ &= \pm 2\pi\sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) = \pm\pi(1-\cos\vartheta)\,.\end{aligned} \tag{25}$$

Das letztere ist die Formel für eine Kugelkappe, welche die Kugel bis zu einem Winkel ϑ einschließt:

$$\frac{\Omega}{2} = \frac{1}{2}\int\mathrm{d}\Omega = \frac{1}{2}\int\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}\vartheta\,\sin\vartheta = \pi(1-\cos\vartheta)\,. \tag{26}$$

Aufgabe 34

a.)

$$[\mathbf{L}, H_D] = [\mathbf{r}\times\mathbf{p}, c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p} + \beta mc^2] = [\mathbf{r}\times\mathbf{p}, c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p}] + mc^2[\mathbf{r}\times\mathbf{p}, \beta] \tag{27}$$

Betrachten wir nun eine einzige Komponente des letzen Ausdrucks:

$$\begin{aligned}[\mathbf{r}\times\mathbf{p}, c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p}] &= c[\varepsilon_{ijk}r_jp_k, \alpha_lp_l] = c\varepsilon_{ijk}\alpha_l[r_jp_k, p_l] = c\varepsilon_{ijk}\alpha_l\big(r_j\underbrace{[p_k,p_l]}_{=0} + \underbrace{[r_j,p_l]}_{=\mathrm{i}\hbar\delta_{jl}}p_k\big) = \\ &= \mathrm{i}\hbar c\varepsilon_{ijk}\alpha_jp_k = \mathrm{i}\hbar c(\boldsymbol{\alpha}\times\mathbf{p})_i\,.\end{aligned} \tag{28}$$

Damit gilt also

$$\boxed{[\mathbf{L}, H_D] = \mathrm{i}\hbar c(\boldsymbol{\alpha}\times\mathbf{p})\,.} \tag{29}$$

b.)

Nun kommen wir zum Kommutator des Spinoperators mit dem Dirac-Hamiltonoperator. Diesen berechnet man am Besten in der Matrixschreibweise:

$$\begin{aligned}[\mathbf{S}, H_D] &= [\mathbf{S}, c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p} + \beta mc^2] = [\mathbf{S}, c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p}] = \\ &= \frac{1}{2}\hbar c\left\{\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0}_2 \\ \mathbf{0}_2 & \boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\mathbf{0}_2 & \mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0}_2\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\mathbf{0}_2 & \mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0}_2\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0}_2 \\ \mathbf{0}_2 & \boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix}\right\} = \\ &= \frac{1}{2}\hbar c\left\{\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}) \\ \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}) & 0\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}0 & (\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{\sigma} \\ (\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix}\right\} = \frac{1}{2}\hbar c\begin{pmatrix}0 & [\boldsymbol{\sigma},\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}] \\ [\boldsymbol{\sigma},\mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}] & 0\end{pmatrix}\,.\end{aligned} \tag{30}$$

Berechnen wir nun einen einzelnen Kommutator:

$$[\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}]_i = [\sigma_i, p_j\sigma_j] = p_j[\sigma_i,\sigma_j] = 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}p_j\sigma_k = 2\mathrm{i}(\mathbf{p}\times\boldsymbol{\sigma})_i\,. \tag{31}$$

Damit ergibt sich schlussendlich:

$$[\mathbf{S}, H_D] = \mathrm{i}\hbar c\begin{pmatrix}\mathbf{0}_2 & \mathbf{p}\times\boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{p}\times\boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0}_2\end{pmatrix} = \mathrm{i}\hbar c\mathbf{p}\times\begin{pmatrix}\mathbf{0}_2 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0}_2\end{pmatrix} = \mathrm{i}\hbar c(\mathbf{p}\times\boldsymbol{\alpha})\,. \tag{32}$$

c.)

Wir erkennen, dass sich die beiden Anteile aus Aufgabenteil (a) und (b) gerade wegheben:

$$[\mathbf{J}, H_D] = [\mathbf{L}, H_D] + [\mathbf{S}, H_D] = \mathrm{i}\hbar c(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) - \mathrm{i}\hbar c(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) = \boxed{0\,.} \tag{33}$$

Damit ist der Gesamtdrehimpuls (im Gegensatz zum Bahndrehimpuls und Spin) eine gute Quantenzahl und kann zusammen mit der Energie gleichzeitig beliebig genau gemessen werden.