Blatt 06: Felder II. Matrizen I

(b)[2](E/M/A) bedeutet: Aufgabe (b) zählt 2 Punkte und ist einfach/mittelschwer/anspruchsvoll
Vorschläge für Zentralübung: Beispielaufgaben 4, 5(bii), 1.
Videos existieren für Beispielaufgaben 1 (V3.4.1), 5 (V3.7.3).

Optionale Aufgabe 1: Wellenfunktionen des 2-dimensionalen harmonischen Oszillators (Polarkoordinaten) [4]
Punkte: (a)[0,5](E); (b)[0,5](E); (c)[3](M)

Die quantenmechanische Behandlung eines zwei-dimensionalen harmonischen Oszillators führt zu sogenannten 'Wellenfunktionen',

$$\Psi_{nm} : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{C}, \mathbf{r} \mapsto \Psi_{nm}(\mathbf{r}) , \quad \text{mit} \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad m \in \mathbb{Z}, \quad m = -n, -n+2, \dots, n-2, n,$$

die in Polarkoordinaten die faktorisierte Form $\Psi_{nm}(\mathbf{r}) = R_{n|m|}(\rho) Z_m(\phi)$ haben, mit $Z_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}$. Diese Wellenfunktionen erfüllen folgende 'Orthonormalitätsrelation':

$$O_{nn'}^{mm'} \equiv \int_{\mathbb{R}^2} \mathrm{d}S \, \overline{\Psi}_{nm}(\mathbf{r}) \Psi_{n'm'}(\mathbf{r}) = \delta_{nn'} \delta_{mm'} \, .$$

Verifizieren Sie diese für $n = 0$, 1 und 2, wobei die radialen Wellenfunktionen wie folgt lauten:

$$R_{00}(\rho) = \sqrt{2} \mathrm{e}^{-\rho^2/2}, \quad R_{11}(\rho) = \sqrt{2} \rho \mathrm{e}^{-\rho^2/2}, \quad R_{22}(\rho) = \rho^2 \, \mathrm{e}^{-\rho^2/2}, \quad R_{20}(\rho) = \sqrt{2} [\rho^2 - 1] \mathrm{e}^{-\rho^2/2}.$$

Gehen Sie dazu wie folgt vor. Aufgrund der Produktform der Wellenfunktionen Ψ zerfällt jedes Flächenintegral in zwei Faktoren die getrennt berechnet werden können, $O_{nn'}^{mm'} = P_{nn'}^{|m||m'|} \widetilde{P}^{mm'}$, wobei P ein radiales Integral und $\widetilde{P}$ ein Winkelintegral darstellt.

(a) Wie lauten die allgemeinen Formen von P und $\widetilde{P}$, als Integrale über R- bzw. Z-Funktionen?

(b) Berechnen Sie das Winkelintegral $\widetilde{P}^{mm'}$ für beliebige Werte von m und m'.

(c) Berechnen Sie nun diejenigen radialen Integrale, die in Kombination mit $\widetilde{P} \neq 0$ auftreten, nämlich P_{00}^{00}, P_{11}^{11}, P_{22}^{22}, P_{22}^{00} und P_{20}^{00}.

Hinweis: Die Euler-Identität, $\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi k} = 1$ falls $k \in \mathbb{Z}$, ist hilfreich bei der Auswertung des Winkelintegrals, und $\int_0^\infty \mathrm{d}x \, x^n \mathrm{e}^{-x} = n!$ für die radialen Integrale.

Hintergrundinformation: Die Funktionen $\Psi_{nm}(\mathbf{r})$ sind die 'Eigenfunktionen' eines quantenmechanischen Teilchens in einem zwei-dimensionalen quadratischen Potential, $V(\mathbf{r}) \propto \mathbf{r}^2$, wobei n und m 'Quantenzahlen' sind, die einen bestimmten 'Eigenzustand' spezifizieren. Ein Teilchen, dass sich in diesem Eigenzustand befindet, wird mit Wahrscheinlichkeit $|\Psi_{nm}(\mathbf{r})|^2 \mathrm{d}S$ im Flächenelement $\mathrm{d}S$ am Ort $\mathbf{r}$ angetroffen. Die Gesamtwahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo in $\mathbb{R}^2$ anzutreffen, ist gleich 1, deswegen liefert das Normierungsintegral $O_{nn}^{mm} = 1$ für *jede* Eigenfunktion $\Psi_{nm}(\mathbf{r})$. Dass das Flächenintegral zweier Eigenfunktionen verschwindet falls ihre Quantenzahlen nicht gleich sind, ist eine Konsequenz der Tatsache, dass die Eigenfunktionen eine orthonormale Basis im Raum der quadratintegrablen komplexen Funktionen auf $\mathbb{R}^2$ bilden.

Optionale Aufgabe 2: Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms (Kugelkoordinaten) [4]
Punkte: [2](M); (b)[2](M); (c)[2](M,Bonus)

Zeigen Sie, dass das Volumenintegral, $P_{nlm} = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}V |\Psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2$, für folgende Funktionen $\Psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta,\phi)$, mit Kugelkoordinaten $\mathbf{r} = \mathbf{r}(r,\theta,\phi)$, den Wert $P_{nlm} = 1$ liefert:

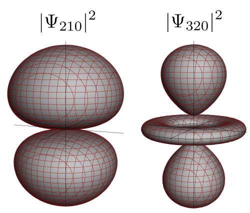
(a) $\Psi_{210}(\mathbf{r}) = R_{21}(r) Y_1^0(\theta,\phi), \qquad R_{21}(r) = \dfrac{r\mathrm{e}^{-r/2}}{\sqrt{24}}, \qquad Y_1^0(\theta,\phi) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos\theta$

(b) $\Psi_{320}(\mathbf{r}) = R_{32}(r) Y_2^0(\theta,\phi), \qquad R_{32}(r) = \dfrac{4\,r^2\mathrm{e}^{-r/3}}{81\sqrt{30}}, \qquad Y_2^0(\theta,\phi) = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3\cos^2\theta - 1)$

(c) Zeigen Sie, dass das 'Überlappintegral' $O = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}V\, \overline{\Psi}_{320}(\mathbf{r}) \Psi_{210}(\mathbf{r})$ gleich 0 ist.

Hinweis: $I_n = \int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^n\, \mathrm{e}^{-x} = n!$

Hintergrundinformation: Die $\Psi_{nlm}(\mathbf{r})$ sind quantenmechanische 'Eigenfunktionen' des Wasserstoffatoms; n, l und m sind 'Quantenzahlen', die den Quantenzustand spezifizieren. Ein Teilchen, dass sich in diesem Zustand befindet, wird mit Wahrscheinlichkeit $|\Psi_{nlm}(\mathbf{r})|^2 \mathrm{d}V$ im Volumenelement $\mathrm{d}V$ am Ort $\mathbf{r}$ angetroffen. Die Gesamtwahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo in $\mathbb{R}^3$ anzutreffen, ist gleich 1, deswegen gilt $P_{nlm} = 1$ für *jede* Eigenfunktion $\Psi_{nlm}(\mathbf{r})$.



Die Figuren zeigen jeweils eine Fläche, auf der $|\Psi_{nlm}|^2$ einen konstanten Wert hat. Die Eigenfunktionen bilden eine orthonormale Basis im Raum der quadratintegrablen komplexen Funktionen auf $\mathbb{R}^3$, folglich verschwindet das Volumenintegral zweier Eigenfunktionen falls ihre Quantenzahlen nicht gleich sind.

Optionale Aufgabe 3: Spin-$\frac{1}{2}$ Matrizen: Eigenwerte und Eigenvektoren [2]
Punkte: (a)[0,5](E); (b)[1,5](E).

Der 'Spin' eines quantenmechanischen Teilchens ist eine Art interner Drehimpuls. Die Beschreibung eines quantenmechanischen Spins erfordert drei Matrizen, S_x, S_y und S_z, deren Kommutatoren die SU(2)-Algebra erfüllen. Der Kommutator zweier Matrizen ist definiert als $[A,B] \equiv AB - BA$. Die $\mathrm{SU}(2)$-Algebra wird definiert durch die Beziehungen $[S_i, S_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk} S_k$, wobei ϵ_{ijk} das antisymmetrische Levi-Civita-Symbol ist (mit $\epsilon_{xyz} = 1$, $\epsilon_{yxz} = -1$, etc.). Zur Beschreibung von quantenmechanischen Teilchen mit Spin s, wobei $s \in \frac{1}{2}\mathbb{Z}$, verwendet man eine Darstellung der $\mathrm{SU}(2)$-Algebra durch Matrizen der Dimension $(2s+1) \times (2s+1)$. Diese haben die Eigenschaft, dass die Matrix $\mathbf{S}^2 \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ gleich $s(s+1)\mathbb{1}$ ist.

Zur Beschreibung quantenmechanischer Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$ werden folgende Matrizen benutzt:

$$S_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

(a) Berechnen Sie $\mathbf{S}^2$. Ist das Ergebnis konsistent mit der erwarteten Form $s(s+1)\mathbb{1}$?

(b) Überprüfen Sie, dass S_x, S_y und S_z die $\mathrm{SU}(2)$-Algebra $[S_i, S_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk} S_k$ erfüllen.

Optionale Aufgabe 4: Spin-1 Matrizen: Vertauschungsrelationen [2]

Punkte: (a)[0,5](E); (b)[1,5](E)

Zur Beschreibung quantenmechanischer Teilchen mit Spin $s = 1$ werden folgende Matrizen benutzt:

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

(a) Berechnen Sie $\mathbf{S}^2 \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$. Ist das Ergebnis konsistent mit der erwarteten Form $s(s+1)\mathbb{1}$?

(b) Überprüfen Sie, dass S_x, S_y und S_z die $\mathrm{SU}(2)$-Algebra $[S_i, S_j] = \mathrm{i}\epsilon_{ijk} S_k$ erfüllen.

Optionale Aufgabe 5: Matrixmultiplikation [2]

Punkte: (a)[1](M); (b)[1](M)

A und B seien $N \times N$-Matrizen mit Matrixelementen $A^i{}_j = a_j \delta^i{}_m$ und $B^i{}_j = b_i \delta^i{}_j$, für eine feste Wahl von $m \in \{1, 2, \ldots, N\}$. *Anmerkung:* da die Indizes i und j links vorgegeben sind, wird rechts *nicht* über sie summiert, obwohl bei $B^i{}_j$ der Index i rechts doppelt vorkommt.

(a) Geben Sie für $N = 3$ und $m = 2$ diese Matrizen explizit in der üblichen Matrixdarstellung an, und berechnen Sie das Matrixprodukt AB explizit.

(b) Berechnen Sie jetzt das Produkt AB für allgemeine $N \in \mathbb{N}$ und $1 \leq m \leq N$. [Kontrollergebnis: die Summe der Diagonalelemente liefert: $\sum_{i=1}^N (AB)^i{}_i = a_m b_m$.]

Optionale Aufgabe 6: Matrixmultiplikation [1]

Punkte: (a)[0.5](E); (b)[0.5](E)

A und B seien $N \times N$-Matrizen mit Matrixelementen $A^i{}_j = a_i \delta^i{}_{N+1-j}$ und $B^i{}_j = b_i \delta^i{}_j$. *Hinweis:* da die Indizes i und j links vorgegeben sind, wird rechts *nicht* über sie summiert, obwohl bei $B^i{}_j$ der Index i rechts doppelt vorkommt.

(a) Geben Sie für $N = 3$ diese Matrizen explizit in der üblichen Matrixdarstellung an, und berechnen Sie das Matrixprodukt AB explizit.

(b) Berechnen Sie das Produkt AB für allgemeine $N \in \mathbb{N}$. [Kontrollergebnis: falls N ungerade ist, liefert die Summe der Diagonalelemente: $\sum_{i=1}^N (AB)^i{}_i = a_{(N+1)/2} b_{(N+1)/2}$.]

[Gesamtpunktzahl Optionale Aufgaben: 15]
