Infos zur Klausur

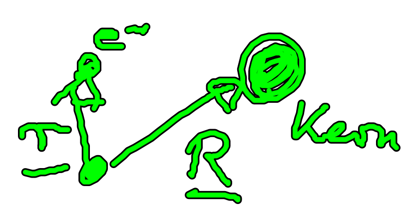
- Ort: Ma 001, Mathe-Gebäude
- Zeit: 2. Juli 2013, 8:00, bitte pünktlich
- Studentenausweis mitbringen
- Papier bekommt ihr von uns, Stifte nicht
- bestanden bei mindestens 50% d. Punkte
- Nachklausur bei 40 – 50% der Punkte am 9. Juli 2013

IX Ausgewählte Probleme

1. Spin-Bahn-Kopplung im Wasserstoffatom

1.1 Phänomenologische Begründung

- Elektron im Atom sieht Kern als bewegte Ladung sieht



→ Kern erzeugt Strom

$$\underline{j}_{Kern}(\underline{r}) = q_{Kern}\,\dot{\underline{r}}\,\delta(\underline{r}-\underline{R})$$

→ nach Biot-Savart-Gesetz erzeugt dieser Strom ein Magnetfeld

$$\underline{B}_{Kern}(\underline{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int d^3r' \,\frac{(\underline{r}-\underline{r}')\times \underline{j}_{Kern}(\underline{r}')}{|\underline{r}-\underline{r}'|}$$

$$\underline{R} = \underline{0}$$

$$\underline{B}_{Kern}(\underline{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} q_{Kern}\,\frac{\underline{r}\times\dot{\underline{r}}}{r^3}$$

$$= \frac{\mu_0 q_{Kern}}{4\pi m_e r^3}\,\underline{L}$$

mit dem Bahndrehimpuls $\underline{L} = \underline{r}\times(m\dot{\underline{r}})$

→ Magnetfeld koppelt über magnetisches Spinmoment an Spin d. Elektrons (VI.1-2)

$$\hat{H}_{SB} = -\hat{\underline{\mu}}_S\cdot\hat{\underline{B}}_{Kern}$$

magnetische Spinmoment

$$\hat{\underline{\mu}}_S = \frac{q_e}{2m_e}\,g\,\hat{\underline{S}}$$

· Hamilton-Operator der Spin-Bahn-WW

$$\hat{H}_{SB} = g(r)\, \underline{\hat{L}} \cdot \underline{\hat{S}}$$

$$g(r) = -\frac{\mu_0 q_{kern} q_e g}{8\pi m_e^2 r^3}$$

· <u>Bemerkungen</u>

(a) · Herleitung ist nicht ganz korrekt, da Bezugssystem rotierendes

$\rightarrow$ „Thomas-Präzession“ (rel. Beschreibg.)

liefert Faktor $\frac{1}{2}$ in $\hat{H}_{SB}$

· vernünftige Herleitung nur im Rahmen der Dirac-Theorie ($\rightarrow$ QM $\underline{\underline{II}}$)

(b) · Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{SB}$$

Hamiltonian des Wasserstoffatoms

· <u>Problem</u>: $\hat{H}_{SB}$ hat nicht die gleichen Eigenzustände wie $\hat{H}_0$

$\Rightarrow$ Lösung: Einführung eines Gesamtdrehimpulses

$$\hat{\underline{J}} = \hat{\underline{L}} + \hat{\underline{S}}$$

1.2 Vollständiger Satz von Observablen bei $\underline{L}\cdot\underline{S}$-Kopplg.

(a) • bisher Eigenzustände des H-Atoms

$$\underbrace{|n, l, m_l\rangle}_{\text{Bahnanteil}} \otimes \underbrace{|s, m_s\rangle}_{\text{Spinanteil des } e^-} = |n, l, m_l, s, m_s\rangle$$

$n = 1, 2, 3, \ldots$ $\qquad s = 1/2$

$l = 0, 1, \ldots, n-1$ $\qquad m_s = \pm 1/2$

$m_l = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$

• Die Operatoren $\hat{H}_0, \hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_z, \hat{\underline{S}}^2, \hat{S}_z$ bilden einen vollständigen Satz untereinander kommutierender Observablen bilden. D.h.

Messung dieser Observablen legt Zustand eindeutig fest

$$\left.\begin{matrix}\hat{H}_0 \\ \underline{\hat{L}}^2 \\ \hat{L}_z \\ \underline{\hat{S}}^2 \\ \hat{S}_z\end{matrix}\right\} |n, l, m_l, s, m_s\rangle = \left\{\begin{matrix}E_n \\ \hbar^2 l(l+1) \\ \hbar l_z \\ \hbar^2 \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right) \\ \hbar m_s\end{matrix}\right\} |n, l, m_l, \ldots$$

$\rightarrow$ Quantenzahlen (QZ) n, l, m_l, s, m_s charakterisieren Zustand

(b) · Mit Spin-Bahn-Kopplung kommutiert $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{SB}$ nicht mehr $\hat{L}_z$ und $\hat{S}_z$

$$\rightarrow [\hat{L}_z, \hat{H}_{SB}] = [\hat{L}_z, g(r)\, \underline{\hat{L}} \cdot \underline{\hat{S}}]$$

$$= g(r) \sum_{n=1}^{3} [\hat{L}_z, \hat{L}_n \hat{S}_n]$$

$$= g(r) \sum_{n=1}^{3} [\hat{L}_z, \hat{L}_n] \hat{S}_n$$

$$\stackrel{i\hbar}{=} g(r)\left(\hat{L}_y \hat{S}_x - \hat{L}_x \hat{S}_y\right) \neq 0 \quad \text{i.A.}$$

analog: $[\hat{S}_z, \hat{H}_{SB}] = i\hbar\, g(r)\left(\hat{L}_x \hat{S}_y - \hat{L}_y \hat{S}_x\right) \neq 0$

$\Rightarrow$ $\hat{L}_z$, $\hat{S}_z$ und $\hat{H}$ sind nicht mehr gleichzeitig diagonalisierbar und haben nicht die gleichen Eigenfunktionen

$\Rightarrow$ mit Spin-Bahn-WW entfallen m_s, m_l zur Charakterisierung der Zustände

- Man muss zwei neue Operatoren finden, welche mit allen Operatoren $\hat{H}$, $\underline{\hat{L}}^2$, $\underline{\hat{S}}^2$ vertauschen

- Beobachtung: $[\hat{L}_z, \hat{H}_{SB}] + [\hat{S}_z, \hat{H}_{SB}] = 0$

  $\rightarrow$ Der Operator $\hat{L}_z + \hat{S}_z$ vertauscht mit $\hat{H}$

$\rightarrow$ Definition: Operator des Gesamtdrehimpulses

$$\boxed{\underline{\hat{J}} = \underline{\hat{L}} + \underline{\hat{S}}}$$

- Es gilt: $\underline{\hat{J}}^2 = (\underline{\hat{L}} + \underline{\hat{S}})^2 = \underline{\hat{L}}^2 + 2\,\underline{\hat{L}} \cdot \underline{\hat{S}} + \underline{\hat{S}}^2$

  $\Rightarrow$ $\hat{J}^2$ vertauscht mit $\hat{H}_{SB}$ & $\hat{H}$

- Die Operatoren $\hat{H}$, $\hat{\underline{L}}^2$, $\hat{\underline{S}}^2$, $\hat{\underline{J}}^2$, $\hat{J}_z$ bilden ein vollständigen Satz kommutierender Observablen.

- neue Zustände $|n, l, s, j, m_j\rangle$

QZ j, m_j sind noch zu bestimmen, sollten aber den Eigenwertgleichungen

$$\hat{\underline{J}}^2 |n, l, s, j, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1) |n, l, s, j, m_j\rangle$$

$$\hat{J}_z |n, l, s, j, m_j\rangle = \hbar m_j |n, l, s, j, m_j\rangle$$

genügen.

1.3 Eigenschaften des Gesamtdrehimpulses

(a) • $\hat{\underline{J}}$ kann als Matrix dargestellt werden

$$\rightarrow \hat{\underline{J}} = \hat{\underline{L}} \underbrace{\mathbb{1}_2}_{2\times 2\text{-Einheitsmatrix}} + \hat{\underline{S}}, \quad \hat{S}_n = \frac{\hbar}{2} \underbrace{\sigma_n}_{\text{Pauli-Matrix}}$$

<u>Bsp.:</u> $\hat{J}_z = \hat{L}_z \mathbb{1}_2 + \hat{S}_z$

$$= \begin{pmatrix} \hat{L}_z & 0 \\ 0 & \hat{L}_z \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{L}_z + \hbar/2 & 0 \\ 0 & \hat{L}_z - \hbar/2 \end{pmatrix}$$

(b) • $\hat{\underline{J}}$ ist ein Drehimpulsoperator & erfüllt die Kommutatorrelation

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k$$

Daraus folgt: $[\hat{J}_z, \hat{\underline{J}}^2] = 0$

• Fragen: Wie lauten die Eigenwerte & -funktionen von $\hat{\underline{J}}^2$ & $\hat{J}_z$? Wie hängen diese mit l, m_l, s, m_s zusammen?

$\longrightarrow$ Löse Eigenwertproblem:

$$\hat{\underline{J}}^2 |\varphi\rangle = \hbar^2 j(j+1) |\varphi\rangle$$

$$\hat{J}_z |\varphi\rangle = \hbar m_j |\varphi\rangle$$

1.3.1 Eigenwertproblem von $\hat{J}_z$

• $\hat{J}_z |\varphi\rangle = \hbar m_j |\varphi\rangle$

• mögliche Lösungen:

$$|\varphi_1\rangle = a_1 |n, l, m_l, s, m_s = \tfrac{1}{2}\rangle + b_1 |n, l, m_l + 1, s, m_s = -\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\varphi_2\rangle = a_2 |n, l, m_l - 1, s, m_s = +\tfrac{1}{2}\rangle + b_2 |n, l, m_l, s, m_s = -\tfrac{1}{2}\rangle$$

• $$\hat{J}_z |\varphi_1\rangle = (\hat{L}_z + \hat{S}_z)\Big(a_1 |n, l, m_l, s, m_s = +\tfrac{1}{2}\rangle + b_1 |n, l, m_l + 1, s, m_s = -\tfrac{1}{2}\rangle\Big)$$

$$= \hbar\Big[a_1 (m_l + \tfrac{1}{2}) |n, l, m_l, s, m_s = \tfrac{1}{2}\rangle + b_1 (m_l + 1 - \tfrac{1}{2}) |n, l, m_l + 1, s, m_s = -\tfrac{1}{2}\rangle\Big]$$

$$= \hbar (m_l + \tfrac{1}{2}) |\varphi_1\rangle$$

$$\rightarrow \hat{J}_z |\varphi_2\rangle = \ldots = \hbar (m_l - \tfrac{1}{2}) |\varphi_2\rangle$$

$\Rightarrow$ <u>Eigenwerte von $\hat{J}_z$</u>: $\boxed{m_j = m_l \pm \tfrac{1}{2} = m_l + m_s}$

$$m_j = \pm\tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{3}{2}, \ldots, \pm(l + \tfrac{1}{2})$$

1.3.2 Eigenwertproblem von $\hat{J}^2$

- $\hat{\underline{J}}^2 = (\hat{\underline{L}} + \hat{\underline{S}})^2 = \hat{\underline{L}}^2 + \hat{\underline{S}}^2 + \underline{2\,\hat{\underline{L}}\cdot\hat{\underline{S}}}$

$$\hat{\underline{J}}^2 = \hat{\underline{L}}^2 + \hat{\underline{S}}^2 + 2\hat{L}_z\hat{S}_z + \hat{L}_+\hat{S}_- + \hat{L}_-\hat{S}_+$$

mit $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$

$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$

- Man kann zeigen

$$\hat{L}_\pm |n, l, m_l, s, m_s\rangle = \hbar\sqrt{(l \pm m_l + 1)(l \mp m_l)}\,|n, l, m_l \pm 1, s, m_s\rangle$$

analog für $\hat{S}_\pm$

- Alles in Eigenwertgleichung

$$\hat{\underline{J}}^2 |\varphi_1\rangle = \hbar^2 j(j+1)\,|\varphi_1\rangle$$

eingesetzen. Nicht-triviale Lösungen nur für

$$j(j+1) = \begin{cases} (l+\tfrac{1}{2})(l+\tfrac{3}{2}) \\ (l-\tfrac{1}{2})(l+\tfrac{1}{2}) \end{cases}$$

$$\boxed{j = l \pm \tfrac{1}{2} = l \pm s}$$

- Analoges für $|\varphi_2\rangle$

- Lösen des Eigenwertproblems liefert die orthonormalen Zustände

- $$|n,l,s,j=l+\tfrac{1}{2},m_j\rangle = \sqrt{\frac{l+m_l+1}{2l+1}}\,|n,l,m_l,s,m_s=+\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$+\sqrt{\frac{l-m_l}{2l+1}}\,|n,l,m_l+1,s,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle$$

$j=l+\frac{1}{2}$

$m_j=-l-\frac{1}{2},\dots,l+\frac{1}{2}$

- $$|n,l,s,j=l-\tfrac{1}{2},m_j\rangle = -\sqrt{\frac{l-m_l+1}{2l+1}}\,|n,l,m_l-1,s,m_s=\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$+\sqrt{\frac{l+m_l}{2l+1}}\,|n,l,m_l,s,m_s=-\tfrac{1}{2}\rangle$$

$j=l-\frac{1}{2}$

$m_j=-l+\frac{1}{2},\dots,l-\frac{1}{2}$

$l=\frac{1}{2},\ m_l=\pm\frac{1}{2}$ → Vgl. Aufgabe 17.(c)

1.4 Auswertung der Spin-Bahn-WW mittels Störungstheorie

- Spin-Bahn-Hamilton-Operator

$$\hat{H}_{SB} = g(r)\,\underline{\hat{L}}\cdot\underline{\hat{S}} = \frac{1}{2}g(r)\left(\underline{\hat{J}}^2-\underline{\hat{L}}^2-\underline{\hat{S}}^2\right)$$

als Störung von $\hat{H}_0$

$$\hat{H} = \hat{H}_0+\hat{H}_{SB}\,,\quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}+V_{coulomb}$$

- Berechne Energiekorrektur zum n-ten Eigenzustand von $\hat{H}_0$. Für $l>0$ ist dieser Zustand entartet $\rightarrow$ benutze entartete Störungstheorie

- Berechne dazu

$$\langle n, l, s, j, m_j | \hat{H}_{SB} | n, l', s, j', m_{j'} \rangle$$

$$= \langle n, l, s, j, m_j | \tfrac{1}{2} g(r) \underbrace{(\hat{\underline{J}}^2 - \hat{\underline{L}}^2 - \hat{\underline{S}}^2) | n, l', s, j', m_{j'} \rangle}_{= \hbar^2 \left[j'(j'+1) - l'(l'+1) - \frac{3}{4} \right] \times | n, l', s, j', m_{j'} \rangle}$$

$$= \frac{1}{2} \hbar^2 \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \langle n, l, s, j, m_j | g(r) | n, l', s, \ldots$$

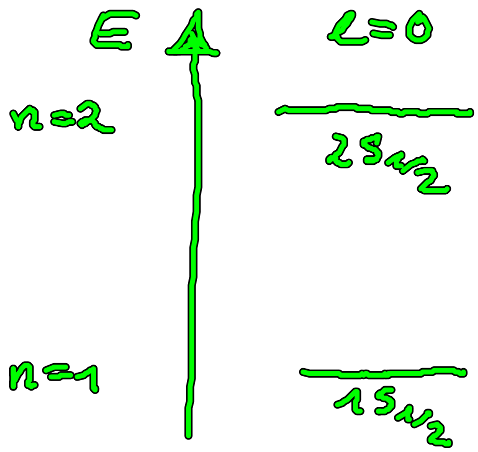
$$\ldots j', m_{j'} \rangle \, \delta_{l,l'} \, \delta_{j,j'} \, \delta_{m_j, m_{j'}}$$

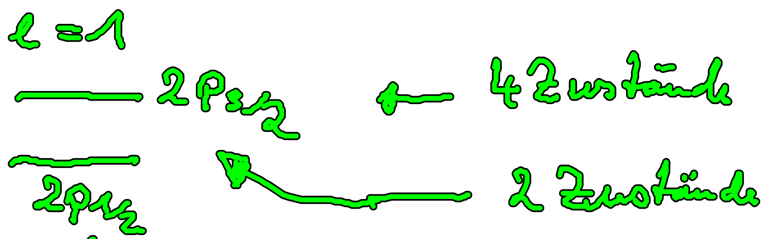
- Ergebnis für die Energiekorrektur des n-ten Zustands:

$\rightarrow$ für $\boxed{\begin{matrix} j = l \pm 1/2 \\ l > 0 \end{matrix}}$: $\dfrac{\hbar}{2} \dfrac{e^2 Z}{8 \pi \varepsilon_0 m_e^2 c^2} \begin{cases} l & \leftarrow j = l + 1/2 \\ -l-1 & \leftarrow l - \frac{1}{2} = j \end{cases} \langle n, l, s, j, m_j | \frac{1}{r^3} | n, l, s, j, m_j \rangle$

$\rightarrow$ für $\boxed{\begin{matrix} j = +1/2 \\ l = 0 \end{matrix}}$: 0, keine Energiekorrektur

- Energiediagramm





Notation: $n \ell_j$

$\ell = 0 : s$
$\ell = 1 : p$
$\vdots$

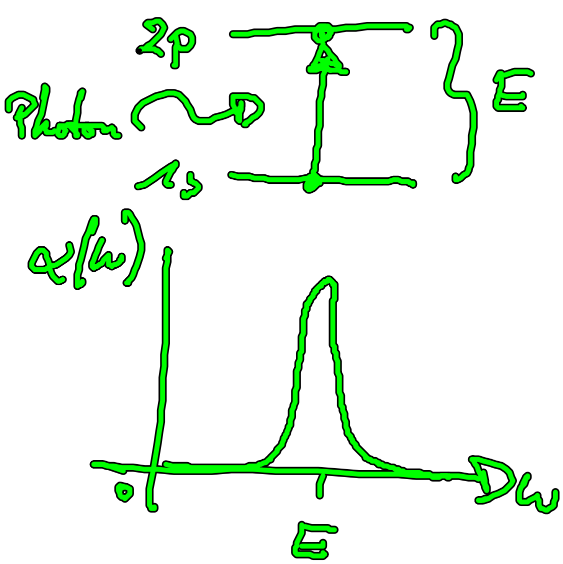
1.5 Energiedubletts und Feinstruktur

$$|n=1, \ell=0\rangle \longrightarrow |n=2, \ell=1\rangle$$

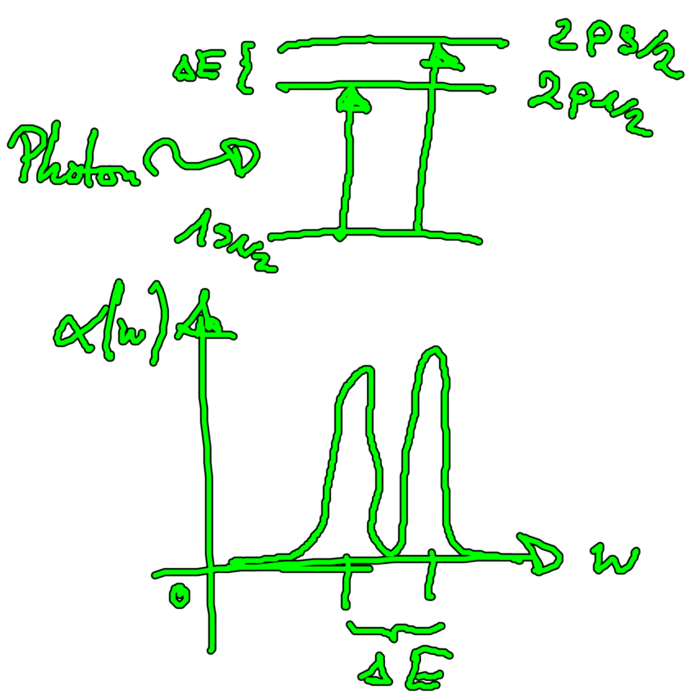
mit $\hat{H}_{SB}$ — 2 Linien im Spektrum

- Photoabsorption

ohne $\hat{H}_{SB}$



mit $\hat{H}_{SB}$



Größenordnung: $E \simeq \frac{3}{4} Ry \simeq 10 eV$

$\Delta E \simeq 10^{-4} eV$

$\Rightarrow$ „Feinstruktur"