

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

↑ magnetische Spinnmoment

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

• Hamilton-Operator der Spin-Bahn-WW

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

$$g(r) = - \frac{\mu_0 g_{\text{Kern}} q_e g}{8\pi m_e^2 r^3}$$

Bemerkungen

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

→ „Thomas-Präzession“ (rel. Beschreibg.)

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

• verknüpfte Herleitung nur im Rahmen der Dirac-Theorie (→ QM II)

(b) • Hamilton-Operator

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

↑ Hamiltonian des Wasserstoffatoms

• Problem: \hat{H}_{SB} hat nicht die gleichen Eigenzustände wie \hat{H}_0

↳ Lösung: Einführung eines Gesamt-
drehimpulses

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

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

(a) • bisher Eigenzustände des H-Atoms

$$|n, l, m_l\rangle \otimes |s, m_s\rangle = |n, l, m_l, s, m_s\rangle$$

Bahnanteil Spinanteil
des e^-

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$s = 1/2$$

$$l = 0, 1, \dots, n-1$$

$$m_s = \pm 1/2$$

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

- 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

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

→ 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

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

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

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

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

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

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

⇒ mit Spin-Bahn-WW enthalten m_s, m_l
Zur Charakterisierung der Zustände

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

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

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

→ Definition: Operator des Gesamtdrehimpulses

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

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

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

• Die Operatoren $\hat{H}_1, \hat{L}_z, \hat{S}_z, \hat{J}_z, \hat{J}_2$ 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

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

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

genügen.

1.3 Eigenschaften des Gesamtdrehimpulses

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

$$\rightarrow \hat{J} = \hat{L} \frac{1}{\hbar} + \hat{S}, \quad \hat{S}_n = \frac{\hbar}{2} \uparrow \sigma_n$$

\uparrow
2x2-Einheitsmatrix

Pauli-Matrix

Bsp.: $\hat{J}_z = \hat{L}_z \frac{1}{\hbar} + \hat{S}_z$

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

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

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

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

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

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

→ Löse Eigenwertproblem:

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

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

1.3.1 Eigenwertproblem von \hat{J}_z

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

- mögliche Lösungen:

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

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

$$\begin{aligned} \hat{J}_z |\varphi_1\rangle &= (\hat{L}_z + \hat{S}_z) \left(a_1 |n, l, m_l, s, m_s = +\frac{1}{2}\rangle + b_1 |n, l, m_l + 1, s, m_s = -\frac{1}{2}\rangle \right) \\ &= \hbar \left[a_1 (m_l + \frac{1}{2}) |n, l, m_l, s, m_s = \frac{1}{2}\rangle + b_1 (m_l + 1 - \frac{1}{2}) |n, l, m_l + 1, s, m_s = -\frac{1}{2}\rangle \right] \\ &= \hbar (m_l + \frac{1}{2}) |\varphi_1\rangle \end{aligned}$$

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

$$\Rightarrow \underline{\text{Eigenwerte von } \hat{J}_z}: \quad \boxed{m_j = m_l \pm \frac{1}{2} = m_l + m_s}$$

$$m_j = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm (l + \frac{1}{2})$$

1.3.2 Eigenwertproblem von \hat{J}^2

$$\cdot \hat{j}^2 = (\hat{L} + \hat{S})^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + \underline{2 \hat{L} \cdot \hat{S}}$$

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

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

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

eingesetzt. Nicht-triviale Lösungen nur für

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

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

• Analoges für $|\varphi_2\rangle$

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

- Berechne dazu

$$\begin{aligned}
 & \langle n, l, s, j, m_j | \hat{H}_{SB} | n, l', s, j', m_{j'} \rangle \\
 &= \langle n, l, s, j, m_j | \frac{1}{2} g(r) (\hat{j}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) | n, l', s, j', m_{j'} \rangle \\
 &= \hbar^2 \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \times \\
 & \quad \times \langle n, l, s, j, m_j | g(r) | n, l', s, j', m_{j'} \rangle \\
 &= \frac{1}{2} \hbar^2 \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \langle n, l, s, j, m_j | g(r) | n, l', s, \dots \\
 & \quad \dots j', m_{j'} \rangle \delta_{l', l} \delta_{j', j} \delta_{m_{j'}, m_j}
 \end{aligned}$$

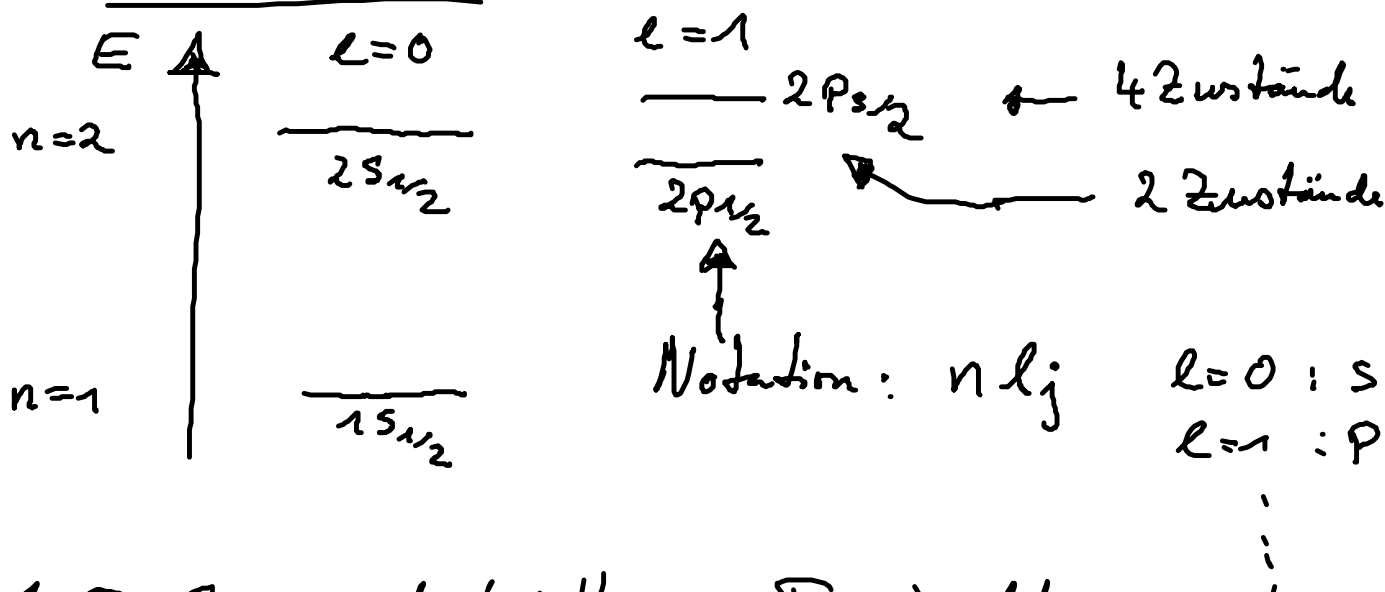
- Ergebnis für die Energiekorrektur des n -ten Zustands:

$$\rightarrow \text{für } \boxed{\begin{matrix} j = l + \frac{1}{2} \\ l > 0 \end{matrix}} : \frac{\hbar}{2} \frac{e^2 z}{8\pi\epsilon_0 m_e c^2} \left\{ \begin{matrix} l \\ -l-1 \end{matrix} \right\} \begin{matrix} \langle n, l, s, 0, m_j | \frac{1}{r^3} \\ | n, l, s, j, m_j \rangle \end{matrix}$$

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

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

• Energiediagramm



1.5 Energie dublett und Feinstruktur

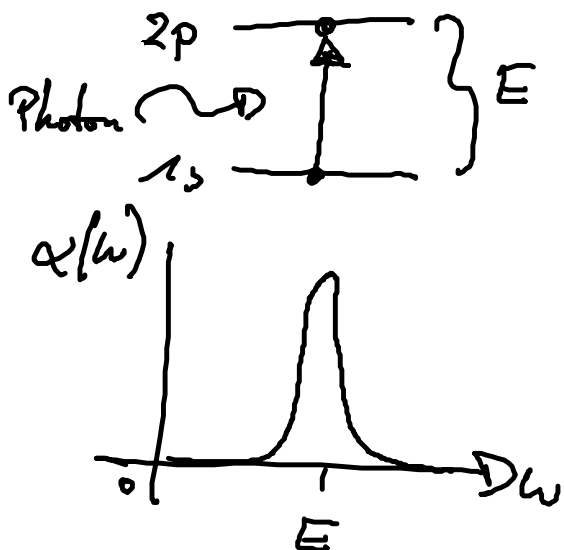
$|n=1, l=0\rangle \longrightarrow |n=2, l=1\rangle$

mit \hat{H}_{SB}

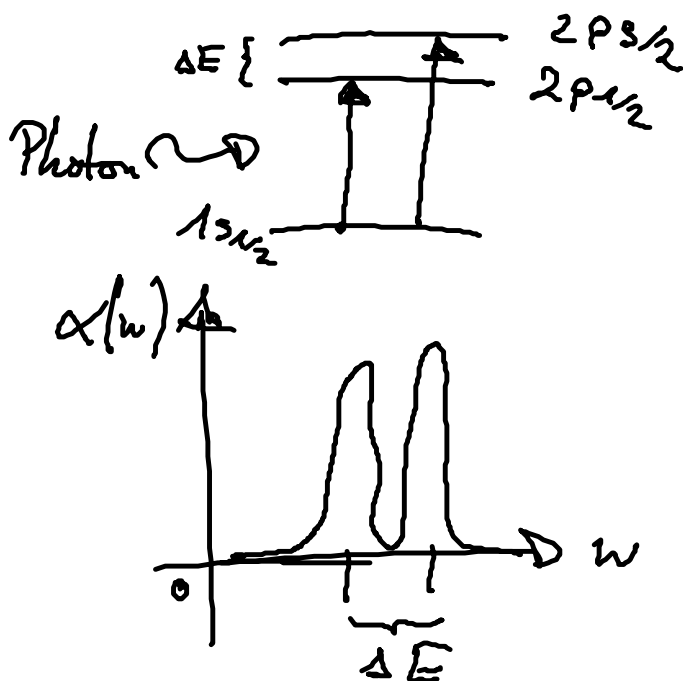
2 Linien im Spektrum

• Photoabsorption

ohne \hat{H}_{SB}



mit \hat{H}_{SB}



Großordnung: $E = \frac{3}{4} R_y \approx 10 \text{ eV}$

$$\Delta E \approx 10^{-4} \text{ eV}$$

→ "Feinstruktur"