

6. Übung zur Vorlesung Atom- und Molekülphysik (E4) SS2023

Besprechung in der Woche vom 12.6.

Aufgabe 18 Drehimpulsalgebra

Seien J_x, J_y, J_z Operatoren, welche folgenden Vertauschungsrelationen genügen

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z, \quad [J_y, J_z] = i\hbar J_x, \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y.$$

Ferner seien der Operator $J^2 := J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$, der Aufsteigeoperator $J_+ := J_x + iJ_y$ und der Absteigeoperator $J_- := J_x - iJ_y$ definiert. Für die (normierten) Eigenzustände $|j, m\rangle$ gilt $J^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle$ und $J_z|j, m\rangle = \hbar m|j, m\rangle$.

- Beweisen Sie, dass J^2 mit allen Komponenten J_x, J_y, J_z kommutiert.
- Beweisen Sie, dass $[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm$ und $[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$.
- Zeigen Sie, dass $J_\pm|j, m\rangle$ Eigenzustände von J_z mit Eigenwerten $\hbar(m \pm 1)$ sind.
- Berechnen Sie J_+J_- und J_-J_+ und leiten Sie daraus einen Ausdruck für J^2 ab, welcher keine Terme mit J_x, J_y enthält.
- Benutzen Sie das Ergebnis aus d) um die Norm von $J_\pm|j, m\rangle$ zu berechnen. Was passiert für $m = \pm j$?

Ein Wasserstoffatom sei im Zustand

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{30}} (|\psi_{100}\rangle + 3|\psi_{211}\rangle + 4|\psi_{210}\rangle + 2|\psi_{21-1}\rangle)$$

- Bestimmen Sie die Erwartungswerte von L^2 und L_z .
- Bestimmen Sie den Erwartungswert von L_x , indem Sie Auf- und Absteigeoperatoren verwenden und explizit auf die Abbruchbedingungen der Leiteroperatoren achten (für $m = l$ verschwindet $L_+|l, m\rangle$ und für $m = -l$ verschwindet $L_-|l, m\rangle$).

Aufgabe 19 Kopplung von Drehimpulsen und Landé-Faktor

Wir betrachten allgemein zwei Drehimpulsoperatoren $\hat{\mathbf{L}}, \hat{\mathbf{S}}$ mit Eigenzuständen $|l, m_l\rangle$ und $|s, m_s\rangle$ zu \hat{L}^2, \hat{L}_z bzw. \hat{S}^2, \hat{S}_z . Wir definieren einen kombinierten Drehimpuls $\hat{\mathbf{J}} := \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$, mit Eigenzuständen $|j, m_j\rangle$ zu \hat{J}^2, \hat{J}_z , welche Linearkombinationen aus $|l, m_l\rangle|s, m_s\rangle$ sind. Für feste Quantenzahlen l und s sollen die Eigenschaften des Produktraums und des Operators untersucht werden.

- Die Zusammensetzung der Drehimpulse erlaubt verschiedene Werte für j . Zeigen Sie, dass $j_{max} = l + s$ gilt.

Hinweis: betrachten Sie den maximalen Wert von m_j .

- Zeigen Sie, dass $j_{min} = |l - s|$ gilt.

Hinweis: bestimmen Sie die Anzahl der Basiszustände im Produktraum $|l, m_l\rangle|s, m_s\rangle$. Die Gesamtheit aller $|j, m_j\rangle$ -Zustände muss gleich dieser sein.

- Der Wechselwirkungsoperator der Spin-Bahn-Kopplung ist proportional zu $\hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$. Zeigen Sie, dass $|j, m_j\rangle$ auch Eigenzustände dieses Operators sind.

- Das magnetische Moment eines Systems ist proportional zu seinem Drehimpuls ($\hat{\boldsymbol{\mu}}_l = -g_l \mu_B \frac{\hat{\mathbf{L}}}{\hbar}$, $\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = -g_s \mu_B \frac{\hat{\mathbf{S}}}{\hbar}$), mit Bohr'schem Magneton $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ und (Landé-)Proportionalitätsfaktor g_l bzw. g_s . Bestimmen Sie den Landé-Faktor g_j des zusammengesetzten Systems für den Spezialfall $g_l = 1, g_s = 2$.

Hinweis: benutzen Sie $g_j = -\frac{\hbar}{\mu_B} \frac{\langle \hat{\boldsymbol{\mu}}_j \cdot \hat{\mathbf{J}} \rangle}{\langle \hat{J}^2 \rangle}$.

Aufgabe 20 (nur E4) Spin-Bahn-Kopplung und Feinstrukturaufspaltung

In dieser Aufgabe wollen wir die Spin-Bahn-Kopplung, die relativistische Korrektur sowie den Darwin-Term und ihren Beitrag zur Feinstruktur des Wasserstoffatoms untersuchen.

- a) Das magnetische Moment des Elektrons ist gegeben durch $\hat{\boldsymbol{\mu}} = -g_s \mu_B \frac{\hat{\mathbf{S}}}{\hbar}$. Im Ruhesystem des Elektrons bewegt sich das Proton um das Elektron und verursacht so ein Magnetfeld vom $\mathbf{B} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{v}}{c^2}$ mit $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ und $\mathbf{E} = e\mathbf{r}/(4\pi\epsilon_0 r^3)$. Dieses Magnetfeld verursacht für das Elektron eine spinabhängige entsprechend des generischen Ausdrucks $H_{\text{SB}} = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{B}$. Bestimmen Sie daraus mithilfe von $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ den Ausdruck der Spin-Bahn-Kopplung in Abhängigkeit vom Operator $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$. Reduzieren Sie dann das Ergebnis um den Faktor 1/2 (Thomas-Faktor, der aus einer relativistischen Rechnung folgt), um daraus den Hamilton-Operator \hat{H}_{SB} zu erhalten.
- b) Der Hamilton-Operator \hat{H}_{SB} hängt vom Produkt $\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}}$ ab. Verwenden Sie den Gesamtdrehimpuls-Operator $\hat{\mathbf{J}} := \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$, um $\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}}$ durch die Operatoren $\hat{\mathbf{J}}^2$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ und $\hat{\mathbf{S}}^2$ auszudrücken.
- c) Berechnen Sie den Erwartungswert der Spin-Bahn-Kopplung $\Delta E_{\text{SB}} = \langle \hat{H}_{\text{SB}} \rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}}$ in Abhängigkeit von den Quantenzahlen l und j .

Hinweise: Verwenden Sie

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{\Psi_{n,l,j,m_j}} = \frac{m^3 c^3 \alpha^3}{\hbar^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)}.$$

Für den Landé-Faktor des Elektrons (mit $s = 1/2$) gilt näherungsweise $g_s \approx 2$, für die Feinstrukturkonstante $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx 1/137$. Der berechnete Ausdruck gilt nur für $l > 0$. Für $l = 0$ verschwindet die Spin-Bahn-Kopplung.

- d) Um einen relativistischen Ausdruck für die Energie des Elektrons zu erhalten, entwickeln Sie

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} \quad (1)$$

in Ordnungen von p^2 bis zur Ordnung von $(p^2)^2$ für kleine p^2 . Der Term der Ordnung p^4 ergibt den relativistischen Hamilton-Operator \hat{H}_R . Berechnen Sie dessen Erwartungswert ΔE_R in Abhängigkeit von den Quantenzahlen l und n .

Hinweis: Es gilt $\langle \Psi_{n,l,j,m_j} | \hat{p}^4 | \Psi_{n,l,j,m_j} \rangle = \frac{4m^4 c^4 \alpha^4}{n^3} \left(\frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right)$.

- e) Berechnen Sie den Erwartungswert ΔE_D des *Darwin-Terms*

$$\hat{H}_D = \frac{\pi \hbar^2 e^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \delta^{(3)}(\mathbf{r}) \quad (2)$$

mit der 3-dimensionalen Dirac'schen Delta-Distribution $\delta^{(3)}(\mathbf{r})$ in Abhängigkeit von n und l .

Hinweis: Es gilt $|\Psi_{n00}(0)|^2 = \frac{1}{\pi n^3 a_0^3}$. Überlegen Sie, für welche Quantenzahlen die Delta-Distribution verschwindet und für welche nicht.

- f) Damit ergeben sich mit den Feinstrukturkorrekturen die Energiewerte

$$E_{n,j}^{\text{FS}} = E_n + \Delta E_{\text{SB}} + \Delta E_R + \Delta E_D. \quad (3)$$

Zeigen Sie, dass, obwohl die Korrekturen selbst teilweise von n , l und j abhängen, $E_{n,j}^{\text{FS}}$ nur noch von n und j abhängt.

Hinweise: Beachten Sie, dass ΔE_{SB} nur für $l \neq 0$ relevant ist, während ΔE_D nur für $l = 0$ einen nicht-verschwindenden Beitrag liefert. Vereinfachen Sie dann $E_{n,j}$ separat für die Fälle $j = l + 1/2$ und $j = l - 1/2$ (bei $l \neq 0$) und $j = 1/2$ (bei $l = 0$) und fassen Sie die Ergebnisse wieder in einem allgemeinen Ausdruck zusammen, der nicht mehr von l abhängt.

- g) Tabellieren Sie die entsprechenden Energiewerte für alle Zustände mit $n \leq 3$. Listen Sie dazu zuerst die möglichen Werte der relevanten Quantenzahlen auf.