

13. ÜBUNGSBLATT ZUR VORLESUNG QUANTENMECHANIK
Abgabe: Dienstag 07.07 bzw. Mittwoch 08.07.2009 in den Übungen.

Die Punkte dieses Aufgabenblatts gelten als Zusatzpunkte.

Aufgabe 34: *Wasserstoffatom, Feinstruktur* **(16 Punkte)**

Anmerkung: In dieser Aufgabe bezeichnen \vec{L} , \vec{S} und \vec{J} Drehimpulsoperatoren. Das Zeichen $\hat{}$ wird bei diesen Operatoren hier weggelassen.

Wir betrachten den Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms

$$\hat{H}_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{\hat{R}} + \hat{W}, \quad Z = 1$$

mit der Spin-Bahn-Wechselwirkung (siehe Vorlesung)

$$\hat{W} = \frac{Ze^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{\hat{R}^3} \vec{S} \cdot \vec{L}$$

Ziel dieser Aufgabe ist es, \hat{W} als Störung von \hat{H}_0 aufzufassen und die daraus folgenden Korrekturen zu den Energien $E_n^{(0)} = -\frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{m_e c^2}{2} \alpha^2 \frac{Z^2}{n^2}$ ($\alpha =$ Feinstrukturkonstante) in erster Ordnung Störungsrechnung zu berechnen. Die Energien $E_n^{(0)}$ hängen nur von der Hauptquantenzahl n ab und nicht von den Drehimpulsquantenzahlen l und m . Wir müssen also die entartete Störungsrechnung anwenden. Wir bezeichnen die gemeinsamen Eigenzustände von \hat{H}_0 , \vec{L}^2 und L_3 mit $|n, l, m_l\rangle$. Es gilt:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 |n, l, m_l\rangle &= E_n^{(0)} |n, l, m_l\rangle \\ \vec{L}^2 |n, l, m_l\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |n, l, m_l\rangle \\ L_3 |n, l, m_l\rangle &= \hbar m_l |n, l, m_l\rangle \\ \psi_{nlm_l}(\vec{r}) &= \langle \vec{r} | n, l, m_l \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\Omega) \end{aligned}$$

Der Spinoperator \vec{S} ist gegeben durch $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\tau}$ mit den Paulimatrizen τ_i . Der Zustandsraum zu $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$ wird aufgespannt durch die Produkte der Eigenzustände zu \hat{S}_3 und den Eigenzuständen $|n, l, m_l\rangle$ von \hat{H}_0 , \vec{L}^2 , L_3 :

$$|n, l, m_l, m_s\rangle := |n, l, m_l\rangle |m_s\rangle$$

a) Zeigen Sie: $\hat{W} \sim \vec{L} \cdot \vec{S}$ kommutiert mit \vec{L}^2 und \vec{S}^2 , aber nicht mit L_3 und S_3 . **(4 Punkte)**

Dies bedeutet, dass die Produktzustände $|n, l, m_l, m_s\rangle$ für die Störungsrechnung aufgrund der Entartung der Energie in l, m_l und m_s keine geeignete Basis bilden. Man muß in dem zu festem l gehörenden Untervektorraum eine neue Basis durch Linearkombination der $|n, l, m_l, m_s\rangle$ bilden, in der dann $\hat{W} \sim \vec{L} \cdot \vec{S}$ diagonal ist (= Drehimpulskopplung). Dazu bildet man aus \vec{L} und \vec{S} den neuen Operator \vec{J} des Gesamtdrehimpulses:

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

b) Zeigen Sie, dass die Komponenten J_i die Kommutatorrelationen eines Drehimpulses erfüllen, d.h. dass gilt

$$[J_i, J_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} J_k.$$

Zeigen Sie weiterhin, dass

$$\begin{aligned} [J_3, \vec{L}^2] &= [J_3, \vec{S}^2] = [J_3, \vec{J}^2] = 0 \\ [\vec{J}^2, \vec{L}^2] &= [\vec{J}^2, \vec{S}^2] = [\vec{L}^2, \vec{S}^2] = 0 \end{aligned}$$

(5 Punkte)

Aus b) folgt, dass es möglich ist, gemeinsame Eigenvektoren zu \vec{J}^2 , J_3 , \vec{L}^2 und \vec{S}^2 zu finden. Wir bezeichnen diese Eigenvektoren mit $|j, m_j; l, s\rangle$ mit

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 |j, m_j; l, s\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m_j; l, s\rangle \\ J_3 |j, m_j; l, s\rangle &= \hbar m_j |j, m_j; l, s\rangle \\ \vec{L}^2 |j, m_j; l, s\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |j, m_j; l, s\rangle \\ \vec{S}^2 |j, m_j; l, s\rangle &= \hbar^2 s(s+1) |j, m_j; l, s\rangle \quad . \end{aligned} \tag{1}$$

Dabei ist $s = 1/2$.

- c) Zeigen Sie, dass die Zustände $|j, m_j; l, s\rangle$ auch Eigenzustände zu $\vec{L} \cdot \vec{S}$ sind und somit \hat{W} in dieser Basis diagonal ist. Bestimmen Sie die zugehörigen Eigenwerte von $\vec{L} \cdot \vec{S}$ (ausgedrückt durch j, l und s). **(3 Punkte)**
- d) Berechnen Sie nun die Energiekorrektur in erster Ordnung Störungstheorie

$$E_n^{(1)} = \langle n; j, m_j; l, s | \hat{W} | n; j, m_j; l, s \rangle .$$

Benutzen Sie dabei (ohne Beweis), dass

$$\langle n; j, m_j; l, s | \frac{1}{\hat{R}^3} | n; j, m_j; l, s \rangle = \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l+1)(l+\frac{1}{2})}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

Die Entartung der Energieeigenwerte $E_n^{(0)}$ wird durch die Energiekorrekturen $E_n^{(1)}$ aufgehoben. Welche Größenordnung hat die Aufspaltung? Betrachten Sie dazu $\frac{E_n^{(1)}}{E_n^{(0)}}$. **(4 Punkte)**