10 Feinstruktur und zeitabhängige Störungstheorie

Übungen, die nach Richtigkeit korrigiert werden:

Aufgabe 10.1: Clebsch-Gordan Koeffizienten für $l = 1$ und $s = 1/2$

Betrachten Sie einen Rotator mit Spin $s = 1/2$ und Bahndrehimpuls $l = 1$. Der Hilbertraum $\mathcal{H}$ für dieses Teilchen ist sechsdimensional und wird durch die gemeinsamen Eigenzustände $|l, m, s, m_s\rangle$ von $\hat{l}^2$, $\hat{l}_z$, $\hat{s}^2$ und $\hat{s}_z$ aufgespannt, wobei $l = 1$, $m = -1, 0, 1$, $s = 1/2$ und $m_s = -1/2, 1/2$. Ziel dieser Aufgabe ist, mithilfe dieser sechs Basiszustände gemeinsame Eigenzustände der Operatoren $\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \hat{\boldsymbol{l}}^2 + \hat{\boldsymbol{s}}^2$ und $\hat{j}_z$ zu konstruieren, wobei $\boldsymbol{j} = \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}$ der gesamte Drehimpuls ist.

(a) Ein beliebiger Zustand $|\psi\rangle$ des Rotators ist eine Linearkombination der sechs Basiszustände,

$$|\psi\rangle = \sum_{m=-1}^{1} \sum_{m_s=-1/2}^{1/2} a_{m,m_s} |l, m, s, m_s\rangle,$$

wobei die a_{m,m_s} komplexe Zahlen sind, $m = -1, 0, 1$, $m_s = -1/2, 1/2$, und mit $l = 1$, $s = 1/2$. Ein solcher Zustand kann durch den Spaltenvektor

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_{-1,-1/2} \\ a_{-1,1/2} \\ a_{0,-1/2} \\ a_{0,1/2} \\ a_{1,-1/2} \\ a_{1,1/2} \end{pmatrix}$$

dargestellt werden. In dieser Notation werden Operatoren durch 6×6 Matrizen dargestellt. Was ist die Matrixdarstellung des Operators $\hat{j}_z$? Was sind die Eigenwerte und was ist ihre Entartung? Was sind die Eigenvektoren?

Die Gleichung

$$\hat{j}_z|\psi\rangle = \hbar \sum_{m=-1}^{1} \sum_{m_s=-1/2}^{1/2} (m + m_s) a_{m,m_s} |l, m, s, m_s\rangle$$

lautet, in Matrix Notation,

$$\hat{j}_z \begin{pmatrix} a_{-1,-1/2} \\ a_{-1,1/2} \\ a_{0,-1/2} \\ a_{0,1/2} \\ a_{1,-1/2} \\ a_{1,1/2} \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} -(3/2)a_{-1,-1/2} \\ -(1/2)a_{-1,1/2} \\ -(1/2)a_{0,-1/2} \\ (1/2)a_{0,1/2} \\ (1/2)a_{1,-1/2} \\ (3/2)a_{1,1/2} \end{pmatrix}.$$

Hieraus folgt, dass $\hat{j}_z$ durch die Matrix

$$\hat{j}_z = \hbar \begin{pmatrix} -3/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3/2 \end{pmatrix}$$

dargestellt wird. Die Eigenwerte dieser Matrix sind:

* $-3/2$; nicht entartet, Eigenvektor $|1,-1,1/2,-1/2\rangle$,
* $-1/2$; zweifach entartet, Vektorraum der Eigenvektoren aufgespannt von $|1,-1,1/2,1/2\rangle$ und $|1,0,1/2,-1/2\rangle$,
* $1/2$; zweifach entartet, Vektorraum der Eigenvektoren aufgespannt von $|1,0,1/2,1/2\rangle$ und $|1,1,1/2,-1/2\rangle$,
* $3/2$; nicht entartet, Eigenvektor $|1,1,1/2,1/2\rangle$.

(b) Zeigen Sie, dass $\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \hat{\boldsymbol{l}}^2 + \hat{\boldsymbol{s}}^2 + \hat{l}_+\hat{s}_- + \hat{l}_-\hat{s}_+ + 2\hat{l}_z\hat{s}_z$.

Dies folgt direkt aus

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \hat{\boldsymbol{l}}^2 + 2\hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}} + \hat{\boldsymbol{s}}^2,$$
$$\hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}} = \hat{l}_x\hat{s}_x + \hat{l}_y\hat{s}_y + \hat{l}_z\hat{s}_z$$

und

$$\hat{l}_x = \frac{1}{2}(\hat{l}_+ + \hat{l}_-), \quad \hat{l}_y = \frac{1}{2i}(\hat{l}_+ - \hat{l}_-), \quad \hat{s}_x = \frac{1}{2}(\hat{s}_+ + \hat{s}_-), \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2i}(\hat{s}_+ - \hat{s}_-).$$

(c) Bestimmen Sie die Matrixdarstellung des Operators $\hat{\boldsymbol{j}}^2$.

Wir berechnen $\hat{j}^2|l,m,s,m_s\rangle$ für die sechs Basisvektoren $|l,m,s,m_s\rangle$:

$$
\begin{aligned}
\hat{j}^2|1,-1,1/2,-1/2\rangle &= \hbar^2\Big[1(1+1)|1,-1,1/2,-1/2\rangle \\
&\quad + \frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{2}\right)|1,-1,1/2,-1/2\rangle \\
&\quad + 2(-1)\left(-\frac{1}{2}\right)|1,-1,1/2,-1/2\rangle\Big] \\
&= \frac{15}{4}\hbar^2|1,-1,1/2,-1/2\rangle \\
\hat{j}^2|1,-1,1/2,1/2\rangle &= \hbar^2\Big[1(1+1)|1,-1,1/2,1/2\rangle \\
&\quad + \frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{2}\right)|1,-1,1/2,1/2\rangle \\
&\quad + \sqrt{2}|1,0,1/2,-1/2\rangle \\
&\quad + 2(-1)\left(\frac{1}{2}\right)|1,-1,1/2,1/2\rangle\Big] \\
&= \frac{7}{4}\hbar^2|1,-1,1/2,1/2\rangle + \hbar^2\sqrt{2}|1,0,1/2,-1/2\rangle, \\
\hat{j}^2|1,0,1/2,-1/2\rangle &= \hbar^2\Big[1(1+1)|1,0,1/2,-1/2\rangle \\
&\quad + \frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{2}\right)|1,0,1/2,-1/2\rangle \\
&\quad + \sqrt{2}|1,-1,1/2,1/2\rangle\Big] \\
&= \frac{11}{4}\hbar^2|1,0,1/2,-1/2\rangle + \hbar^2\sqrt{2}|1,-1,1/2,1/2\rangle, \\
\hat{j}^2|1,0,1/2,1/2\rangle &= \hbar^2\Big[1(1+1)|1,0,1/2,1/2\rangle \\
&\quad + \frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{2}\right)|1,0,1/2,1/2\rangle \\
&\quad + \sqrt{2}|1,1,1/2,-1/2\rangle\Big] \\
&= \frac{11}{4}\hbar^2|1,0,1/2,1/2\rangle + \hbar^2\sqrt{2}|1,1,1/2,-1/2\rangle,
\end{aligned}
$$

$$\begin{aligned}
\hat{j}^2|1,1,1/2,-1/2\rangle &= \hbar^2\Bigg[1(1+1)|1,1,1/2,-1/2\rangle \\
&\quad + \frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{2}\right)|1,1,1/2,-1/2\rangle \\
&\quad + \sqrt{2}|1,0,1/2,1/2\rangle \\
&\quad + 2(1)\left(-\frac{1}{2}\right)|1,1,1/2,-1/2\rangle\Bigg] \\
&= \frac{7}{4}\hbar^2|1,-1,1/2,1/2\rangle + \hbar^2\sqrt{2}|1,0,1/2,1/2\rangle, \\
\hat{j}^2|1,1,1/2,1/2\rangle &= \hbar^2\Bigg[1(1+1)|1,1,1/2,1/2\rangle \\
&\quad + \frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{2}\right)|1,1,1/2,1/2\rangle \\
&\quad + 2(1)\left(\frac{1}{2}\right)|1,1,1/2,1/2\rangle\Bigg] \\
&= \frac{15}{4}\hbar^2|1,1,1/2,1/2\rangle.
\end{aligned}$$

Hieraus ergibt sich die Matrixdarstellung

$$\hat{\boldsymbol{j}}^2 = \hbar^2 \left(\begin{array}{c|cc|cc|c}
\frac{15}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline
0 & \frac{7}{4} & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\
0 & \sqrt{2} & \frac{11}{4} & 0 & 0 & 0 \\ \hline
0 & 0 & 0 & \frac{11}{4} & \sqrt{2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & \sqrt{2} & \frac{7}{4} & 0 \\ \hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{15}{4}
\end{array}\right).$$

Bemerkung: Eigentlich ist es nicht nötig, die Wirkung von $\hat{j}^2$ auf alle sechs Basisvektoren auszurechnen, da die Matrixdarstellung von $\hat{j}^2$ symmetrisch unter "Spiegelung" $m \to -m$, $m_s \to -m_s$ ist. Damit reicht es aus, den oberen 3×3 Teil der Matrix zu bestimmen.

(d) Da die Operatoren $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ und $\hat{j}_z$ vertauschbar sind, gibt es eine Basis gemeinsamer Eigenvektoren $|j, m_j, l, s\rangle$ (wobei $s = 1/2$). Bestimmen Sie diese Basisvektoren.
Bemerkung: Die Skalarprodukte $\langle l, m, s, m_s|j, m_j, l, s\rangle$, die die Expansion der Eigenvektoren $|j, m_j, l, s\rangle$ in der Basis der Produktzustände $|l, m, s, m_s\rangle$ festlegen, werden "Clebsch-Gordan Koeffizienten" genannt.

Die Matrixdarstellung des Operators $\hat{\boldsymbol{j}}^2$ besteht aus vier Blöcke, die getrennt diagonalisiert werden können. Jedes Block gehört zu einem Eigenwert von $\hat{j}_z$.

Das erste Block gehört zum Eigenwert $j_z = m_j\hbar$ mit $m_j = -3/2$ und hat Dimension 1×1. Der zugehörige $\hat{\boldsymbol{j}}^2$-Eigenwert ist $j(j+1)\hbar^2$ mit $j = 3/2$ und der Eigenvektor ist

$$|j = 3/2, m_j = -3/2, l = 1, s = 1/2\rangle = |1, -1, 1/2, -1/2\rangle.$$

Das zweite Block gehört zum Eigenwert $j_z = m_j\hbar$ mit $m_j = -1/2$ und hat Dimension 2×2. Die zugehörigen $\hat{\boldsymbol{j}}^2$-Eigenwerte sind $j(j+1)\hbar^2$ mit $j = 3/2$ und $j = 1/2$, und die Eigenvektoren sind

$$\begin{aligned}
|j = 3/2, m_j = -1/2, l = 1, s = 1/2\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|1, -1, 1/2, 1/2\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 0, 1/2, -1/2\rangle, \\
|j = 1/2, m_j = -1/2, l = 1, s = 1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|1, -1, 1/2, 1/2\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|1, 0, 1/2, -1/2\rangle.
\end{aligned}$$

Das dritte Block gehört zum Eigenwert $j_z = m_j\hbar$ mit $m_j = 1/2$ und hat Dimension 2×2. Die zugehörigen $\hat{\boldsymbol{j}}^2$-Eigenwerte sind $j(j+1)\hbar^2$ mit $j = 3/2$ und $j = 1/2$, und die Eigenvektoren sind

$$\begin{aligned}
|j = 3/2, m_j = 1/2, l = 1, s = 1/2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 0, 1/2, 1/2\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|1, 1, 1/2, -1/2\rangle, \\
|j = 1/2, m_j = 1/2, l = 1, s = 1/2\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|1, 0, 1/2, 1/2\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1, 1, 1/2, -1/2\rangle.
\end{aligned}$$

Das vierte Block gehört zum Eigenwert $j_z = m_j\hbar$ mit $m_j = 3/2$ und hat Dimension 1×1. Der zugehörige $\hat{\boldsymbol{j}}^2$-Eigenwert ist $j(j+1)\hbar^2$ mit $j = 3/2$ und der Eigenvektor ist

$$|j = 3/2, m_j = 3/2, l = 1, s = 1/2\rangle = |1, 1, 1/2, 1/2\rangle.$$

Übungen, die nach Aufwand korrigiert werden:

Aufgabe 10.2: Normaler und anormaler Zeeman-Effekt

Die Energieniveaus des Wasserstoffatoms werden durch ein Magnetfeld aufgespaltet. Wie die Aufspaltung sich gestaltet hängt von der relativen Grösse der magnetischen (Zeeman) Energie und der Feinstruktur-Aufspaltung ab.
Für den "normalen Zeeman-Effekt" (oder "Paschen-Back-Effekt") ist die magnetische Energie grösser als die Feinstruktur-Aufspaltung. Für diesen Effekt wird zuerst die magnetische Energie berücksichtigt. Eventuelle relativistische Korrekturen werden nachträglich in Störungstheorie behandelt.

(a) Der Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms in einem homogenen Magnetfeld in z-Richtung ist

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{\mu_{\rm B}}{\hbar} B_z(\hat{l}_z + g\hat{s}_z),$$

mit $g = 2$. Zeigen Sie, dass die Zustände $|nlmm_s\rangle$ Eigenzustände dieses Hamilton-Operators sind und berechnen Sie die zugehörenden Energie-Eigenwerte. Wie sieht die Aufpaltung der Energieniveaus mit $n = 1$ und $n = 2$ aus? Wird die Entartung des $n = 2$-Niveaus ganz aufgehoben?

Man findet

$$\hat{H}|nlmm_s\rangle = E_{nlmm_s}|nlmm_s\rangle$$

mit

$$E_{nlmm_s} = -\frac{e^2}{2a_0 n^2} - \mu_{\rm B} B(m + gm_s).$$

Das Energieniveau mit $n = 1$ wird in zwei Niveaus mit $m_s = \pm 1/2$ und $m = 0$ aufgespaltet. Das Energieniveau $n = 2$ wird in fünf Niveaus aufgespaltet, wobei die Niveaus mit $m = 1$ und $m_s = -1/2$ einerseits und $m = -1$ und $m_s = 1/2$ andererseits entartet sind.

(b) Da im Limes des normalen Zeeman-Effektes die relativistischen Korrekturen im Vergleich zur magnetfeldabhängingen Aufspaltung klein sind, kann der Effekt der relativistischen Korrekturen in Störungstheorie behandelt werden. Berechnen Sie die weitere Verschiebung oder Aufspaltung der Niveaus durch die Spin-Bahn Kopplung

$$\hat{H}_{\rm so} = \frac{1}{2m^2c^2} \hat{\boldsymbol{s}} \cdot \hat{\boldsymbol{l}} \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr} V(r) \right),$$

mit $V(r) = -e^2/r$.

1. Hinweis: Benützen Sie die Identität $\hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}} = \frac{1}{2}(\hat{l}_+\hat{s}_- + \hat{l}_-\hat{s}_+) + \hat{l}_z\hat{s}_z$. *2. Hinweis: Benützen Sie die Mittelwerte*

$$\langle nlmm_s|r^{-3}|nlmm_s\rangle = \frac{2Z^3}{l(l+1)(2l+1)n^3a_0^3}$$

für $l > 0$.

Die zwei Termen $\hat{l}_+\hat{s}_-$ und $\hat{l}_-\hat{s}_+$ ändern m und m_s um eins, und haben deshalb keine nichtverschwindenden Matrixelemente zwischen Zustände mit gleicher Energie in Abwesenheit der Spin-Bahn Kopplung. So bleibt nur der Term $\hat{l}_z\hat{s}_z$, dessen Erwartungswert $\hbar^2 mm_s$ ist. Damit finden wir, dass Spin-Bahn Kopplung für $l > 0$ zu einer Energie-Verschiebung

$$
\begin{aligned}
\delta E_{nlmm_s} &= \langle nlmm_s|\hat{H}_{\mathrm{so}}|nlmm_s\rangle \\
&= \frac{Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2} mm_s \frac{2Z^3}{l(l+1)(2l+1)n^3a_0^3} \\
&= \frac{Z^2e^2}{2a_0n^2}\frac{(Z\alpha)^2}{n}\frac{2mm_s}{l(l+1)(2l+1)n}
\end{aligned}
$$

führt.

Für den "anormalen Zeeman-Effekt" ist die magnetische Energie viel kleiner als die Feinstruktur-Aufspaltung. Für diesen Effekt wird zuerst die Feinstruktur-Aufspaltung betrachtet. Die weitere Aufspaltung durch das Magnetfeld wird nachträglich in Störungstheorie behandelt.

(c) Mit den relativistischen Korrekturen werden die gebundenen Eigenzustände $|njlm_j\rangle$ des Wasserstoffatoms durch Quantenzahlen n, j, l, und m_j enumeriert, wobei $j = l \pm 1/2$ und

$$E_{nj} = -\frac{e^2}{2a_0n^2}\left[1 - \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+1/2}\right)\right].$$

Berechnen Sie die weitere Aufspaltung dieser Energieniveaus durch den Zeeman-Effekt für den Fall $l = 1$.

Hinweis: Benützen Sie Ihre Lösung von Aufgabe 10.1.

Die Verschiebung der Energieniveaus ist

$$\delta E_{njlm_j} = -\frac{\mu_{\mathrm{B}}B_z}{\hbar}\langle njlm_j|\hat{l}_z + g\hat{s}_z|njlm_j\rangle.$$

Wir schreiben nun

$$|jm_jls\rangle = a_{j,l,m_j}|lm_j - 1/2\rangle|\uparrow\rangle + b_{j,l,m_j}|lm_j + 1/2\rangle|\downarrow\rangle,$$

wobei die Koeffizienten a_{j,l,m_j} und b_{j,l,m_j} für den Fall $l = 1$ in Aufgabe 10.1 berechnet wurden. Damit ergibt sich, dass

$$\delta E_{njlm_j} = -\frac{\mu_{\mathrm{B}}B_z}{\hbar}\left(|a_{jlm_j}|^2((m_j - 1/2) + g/2) + |b_{jlm_j}|^2((m_j + 1/2) - g/2)\right).$$

In Aufgabe 10.1 wurde gezeigt, dass

$$|a_{jlm_j}|^2 = \frac{1 + m_j + 1/2}{3}, \quad |b_{jlm_j}|^2 = \frac{1 - m_j + 1/2}{3}$$

für den Fall $l = 1$ und $j = 3/2$, während

$$|a_{jlm_j}|^2 = \frac{1 - m_j + 1/2}{3}, \quad |b_{jlm_j}|^2 = \frac{1 + m_j + 1/2}{3}$$

für den Fall $l = 1$ und $j = 1/2$. Mit $g = 2$ findet man dann, dass

$$\begin{aligned} \delta E_{njlm_j} &= -\frac{\mu_\mathrm{B} B_z}{\hbar}\left[\frac{(1 + m_j + 1/2)(m_j + 1/2) + (1 - m_j + 1/2)(m_j - 1/2)}{3}\right] \\ &= -\frac{4\mu_\mathrm{B} B_z m_j}{3\hbar}, \end{aligned}$$

für $j = 3/2$, während für $j = 1/2$ das Ergebnis

$$\delta E_{njlm_j} = -\frac{2\mu_\mathrm{B} B_z m_j}{3\hbar}$$

lautet.

Aufgabe 10.3: Harmonischer Oszillator in zeitabhängigem elektrischen Feld

Betrachten Sie einen eindimensionalen harmonischen Oscillator der Masse m, Ladung e und Frequenz ω in einem zeitabhängigen elektrischen Feld $E(t)$.

(a) Geben Sie den Hamilton-Operator für dieses System an.

Der Hamilton-Operator ist

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 - eE(t)\hat{x}.$$

Der Oszillator sei im Energie-Eigenzustand $|n\rangle$ zum Zeitpunkt $t = 0$. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, dass der Oszillator zu einem Zeitpunkt $t \to \infty$ in einem anderen Energie-Eigenzustand $|n'\rangle$ gefunden wird für den Fall, dass

(b) $E(t) = E_0 e^{-\gamma t}$ (mit $\gamma > 0$),

Die Übergangswahrscheinlichkeit ist

$$P_{n'n} = \frac{e^2}{\hbar^2}\left|\int_0^\infty dt E(t)\langle n'|\hat{x}|n\rangle e^{-i\omega(n-n')t}\right|^2$$

Mit

$$\langle n'|\hat{x}|n\rangle = \frac{x_0}{2}\left(\sqrt{2n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{2(n+1)}\delta_{n',n+1}\right),$$

wobei $x_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$, findet man, dass nur die Übergangswahrscheinlichkeiten

$$P_{n+1,n} = \frac{e^2(n+1)}{2\hbar m\omega}\left|\int_0^\infty dt E(t) e^{i\omega t}\right|^2$$

und

$$P_{n-1,n} = \frac{e^2 n}{2\hbar m\omega}\left|\int_0^\infty dt E(t) e^{-i\omega t}\right|^2$$

nicht null sind. Einsetzen von $E(t) = E_0 e^{-\gamma t}$ ergibt dann

$$P_{n+1,n} = \frac{e^2 E_0^2 (n+1)}{2\hbar m\omega(\gamma^2+\omega^2)}, \quad P_{n-1,n} = \frac{e^2 E_0^2 n}{2\hbar m\omega(\gamma^2+\omega^2)}.$$

(c) $E(t) = E_0\gamma^{-1}\delta(t-t_0)$ (mit $t_0 > 0$).

Einsetzen von $E(t) = E_0\gamma^{-1}\delta(t-t_0)$ in (b) gibt

$$P_{n+1,n} = \frac{e^2 E_0^2 (n+1)}{2\hbar m\omega\gamma^2}, \quad P_{n-1,n} = \frac{e^2 E_0^2 n}{2\hbar m\omega\gamma^2}.$$