

Theoretische Physik III
- Quantenmechanik (SoSe 2018) -

Übungsblatt 07 (20 + π Punkte)¹

Ausgabe 04.06.18 – Abgabe 12.06.18 – Besprechung n.V.

Aufgaben mit Sternchen sind Klausurisomorph

▷ **Aufgabe 1 (Addition von Bahndrehimpuls und Spin- $\frac{1}{2}$)** (6 Punkte)

[Klausurrelevant? Nicht in dieser Form – aber die Kopplung $\ell = 1$ an $s = 1/2$ könnte durchaus “dran” kommen ...]

Wird beim Wasserstoffproblem auch der Spin der Elektrons berücksichtigt ist mit

$$\hat{j} := \hat{l} + \hat{s} \quad (1)$$

der Gesamtdrehimpuls des Elektrons verabredet.

Gemeinsame Eigenzustände zu \hat{j}^2 , \hat{j}_z , \hat{l}^2 und \hat{s}^2 werden notiert $|jm_jls\rangle$, wenn nötig Kom-
mata zwischen den Einträgen, worin Quantenzahlen j, m_j, ℓ und s definitiosgemäß

$$\begin{aligned} \hat{j}^2|jm_jls\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|jm_jls\rangle, & \hat{j}_z|jm_jls\rangle &= \hbar m_j|jm_jls\rangle, \\ \hat{l}^2|jm_jls\rangle &= \hbar^2 \ell(\ell+1)|jm_jls\rangle, & \hat{s}^2|jm_jls\rangle &= \hbar^2 s(s+1)|jm_jls\rangle, \end{aligned} \quad (2)$$

Der Wert von s liegt natürlich fest, $s = \frac{1}{2}$, der Wertebereich von ℓ ist variabel $\ell = 0, 1, 2, \dots$.
Zu jedem ℓ (mit Ausnahme $\ell = 0$) gibt es zwei mögliche Werte $j = \ell \pm \frac{1}{2}$. Für $\ell = 0$ gibt
es nur ein $j = \frac{1}{2}$.

Das Ziel ist es, die $|jm_jls\rangle$ durch eine Linearkombination der Produktzustände $|\ell m_\ell; s\mu\rangle :=$
 $|\ell m_\ell\rangle \otimes |s\mu\rangle$ auszudrücken, wobei Quantenzahlen m_ℓ und μ definitionsgemäß $\hat{l}_z|\ell m_\ell s\mu\rangle =$
 $\hbar m_\ell|\ell m_\ell s\mu\rangle$, $m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$, und $\hat{s}_z|\ell m_\ell s\mu\rangle = \hbar \frac{\mu}{2}|\ell m_\ell s\mu\rangle$ mit $\mu = \pm 1$. In jedem
Fall $m_j = -j, -j + 1, \dots, j$.

Zeigen Sie: Für $\ell = 1, 2, \dots$

$$|\ell \pm \frac{1}{2}, m_j; \ell, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} + m_j}{2\ell + 1}}|\ell, m_j \mp \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\pm\rangle \pm \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} - m_j}{2\ell + 1}}|\ell, m_j \pm \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\mp\rangle \quad (3)$$

und für $\ell = 0$

$$|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}; 0\frac{1}{2}\rangle = |0, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}\pm\rangle. \quad (4)$$

Spektroskopisch notiert man die m_j -Multipletts in der Form $n\ell_j$, etwa $2p_{\frac{1}{2}}$ oder $2p_{\frac{3}{2}}$. In
der Grobstruktur (“Kepler-Atom”) sind diese beiden Niveaus anenergetisch entartet. Wird
die Wechselwirkung des Spins mit dem Bahndrehimpuls in der Feinstruktur erfasst, wird
diese Entartung aufgehoben.

¹Aufgaben mit transzendenter Punktezahl sind fakultative Nüsse. Nüsse sind bekanntlich nahrhaft ...

▷ **Aufgabe 2** Ritz'sches Theorem] (4 Punkte)

Beweisen Sie das Ritz'sche Theorem wonach das Funktional $E[\psi] = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ genau dann stationär, $\delta E[\psi] = 0$, wenn $\psi = \psi_0$ Eigenvektor von \hat{H} , etwa $\hat{H}\psi_0 = E_0\psi_0$. Schließen Sie aus diesem Theorem $E[\psi] \geq E_0$, wobei E_0 die Grundzustandsenergie. Stöbern Sie im Lehrbuch und geben eine Anwendung an.

▷ **Aufgabe 3 (Grundzustandsenergie mittels Ritz)*** (4 Punkte)

Schätzen Sie mittels Ritz'schem Theorem die Grundzustandsenergie eines Elektrons im Coulombfeld des Z -fach geladenen Kern ab. Benutzen Sie als Variationsansatz $\propto e^{-\kappa r}$ mit κ Variationsparameter. Wie vergleicht sich Ihr Ergebnis mit dem exakten Wert?

▷ **Aufgabe 4 (Hyperfeinstruktur)** (6 Punkte)

[Was die HFS ist. und wo sie herkommt, sollte man wissen ...]

In der Hyperfeinstruktur (HFS) wird die Wechselwirkung zwischen dem Elektronenspin und dem Protonenspin (Fall: atomarer Wasserstoff) berücksichtigt. Das magnetische Moment des Protons, $\vec{\mu}_p = \gamma_p \vec{s}_p$, $\gamma_p \approx 2,79 e_0/m_p$, erzeugt am Ort \vec{x} ein Magnetfeld

$$\vec{B}_p(\vec{x}) = -\frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left(\vec{\mu}_p - 3 \frac{(\vec{\mu}_p \cdot \vec{x}) \vec{x}}{r^2} \right) + \frac{2\mu_0}{3} \vec{\mu}_p \delta(\vec{x}). \quad (5)$$

wobei angenommen wurde, dass das Proton im Ursprung plaziert ist, und $r = |\vec{x}|$.

Die Einstellenergie des magnetischen Moments des Elektrons, $\mu_e = -\gamma_e \vec{s}_e$, $\gamma_e = e_0/m_e$ (Annahmen: $g = 2$), lautet

$$\hat{H}_{\text{HFS}} = -\hat{\vec{\mu}}_e \cdot \vec{B}_p(\hat{\vec{q}}) \quad (6)$$

Um den Effekt auf den Grundzustand von Wasserstoff abzuschätzen behandeln wir \hat{H}_{HFS} hinsichtlich der Translationsfreiheitsgrade des Elektrons in erster Ordnung Störungstheorie, behalten aber die Spinfreiheitsgrade bei. Bei der Mittlung des Magnetfeldes über die Gewichtsfunktion $|\psi_{100}(\vec{x})|^2$ trägt nur der Kontaktterm bei (warum?), und daher

$$\hat{H}_{\text{HFS}} = -\frac{2\mu_0}{3} \hat{\vec{\mu}}_e \hat{\vec{\mu}}_p |\psi_{100}(0)|^2 = \frac{A}{\hbar^2} \hat{s}_e \cdot \hat{s}_p \quad (7)$$

worin

$$A = \frac{16}{3} \times 2,79 \frac{m_e}{m_p} \alpha^2 E_{\text{Ry}} \approx 5,87 \times 10^{-6} \text{eV}. \quad (8)$$

bzw $\nu = A/h \approx 1417 \text{MHz}$ oder $\lambda = c/\nu \approx 21 \text{cm}$.

- (a) Zeigen Sie dass der Hamiltonoperator (7) zu Eigenwerten und Eigenzuständen Anlass gibt

$$\begin{aligned} E_+ &= E_0 + A/4 && \text{im Triplet } |S = 1, M\rangle, M = -1, 0, 1, \\ E_- &= E_0 - 3A/4 && \text{im Singlet } |S = 0, M = 0\rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

- (b) In einem äußeren Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$ spaltet das Triplet auf und das Singlet wird verschoben. Berechnen Sie – exakt! – diese Aufspaltung/Verschiebung als Funktion der Magnetfeldstärke (die Kopplung des Protonenspins an das Feld dürfen Sie dabei getrost vernachlässigen. Warum?). Machen Sie sich ein Bild (Energiewerte vs B), identifizieren das “Zeeman-Regime” kleiner Feldstärken und das Paschen-Back Regime großer Feldstärken.

Bemerkung: Die Hyperfeinstruktur im Grundzustand von atomarem Wasserstoff spielt in der Astrophysik eine wichtige Rolle (21cm-Linie), und wird gerne für Tests der allgemeinen Relativitätstheorie verwendet (gravitative Rotverschiebung). Der Hyperfeinübergang im Cs-133 Isotop dient der Definition der Sekunde: eine Sekunde sind genau 9 192 631 770 Perioden der entsprechenden Linie. Der Übergang ist übrigens äußerst schwach, da elektrisch Dipol-verboten, mit einer Lebensdauer $\sim 3,5 \times 10^{14} \text{sec} \sim 10^7 \text{Jahre}$ (aufgrund magnetischer Dipol- und elektrischer Quadrupolübergänge).

Im übrigen bezieht sich die Platte der Pionier 10 Mission, die die Nachricht von unserer Zivilisation ins All trägt, auf die Hyperfeinstruktur von atomarem Wasserstoff um eine Längen und Zeitskala zu kommunizieren ...

▷ **Aufgabe 5 (Wohnst-Du-noch)**

(π Punkte)

Bei einem Möbelhaus Ihrer Wahl kaufen Sie Spin-1/2 Teilchen. Beim Auspacken stellen Sie fest, dass man vergessen hat, den Zustand auf dem Beipackzettel anzugeben. Geben Sie ein Verfahren an, um den Zustand der erworbenen Teilchen zu charakterisieren. Zur Verfügung steht Ihnen ein Stern-Gerlach Magnet mit variabler Orientierung.