Hinweis

Die vorliegende Lösung wurde im Rahmen der jeweiligen Lehrveranstaltung an der Universität Bonn erstellt. Sofern im oberen Teil der ersten Seite oder auf der unten angegebenen Webseite nicht anders vermerkt, wurde diese Lösung von mir, Marvin Zanke, alleine angefertigt und eingereicht. Bei allem in einer anderen Farbe als dem üblichen Blau handelt es sich in der Regel um Korrekturen von mir oder des Tutors. Für mehr Informationen und meine gesamten Unterlagen, siehe:
https://www.physics-and-stuff.com/

Ich erhebe keinen Anspruch auf Richtigkeit und Vollständigkeit der vorliegenden Lösungen! Dies gilt ebenso für obengenannte Korrekturen.

08.07.16 Theoretische Physik III Blatt 11 Marvin Zanke

Es gilt wie bereits gezeigt:

- $\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$

$$= \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2} r - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\vec{L}^2$$

- $L_3 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$
- $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{e^2}{r}$

a	b	c	d	Σ
2/2	4/5	-1/10	-1/3	6/20

Z: $[J_3, H_0] \overset{!}{=} [J_3, H_{LS}] \overset{!}{=} 0$

$[\vec{J}^2, H_0] \overset{!}{=} [\vec{J}^2, H_{LS}] \overset{!}{=} 0$

$[\vec{L}^2, H_0] \overset{!}{=} [\vec{L}^2, H_{LS}] \overset{!}{=} 0$ ✓

Sollten die ganzen Dinger nicht auch mit $|\vec{S}|^2$ vertauschen? Oder warum soll man das nicht zeigen?

ja, tun sie auch. Vermutlich wurde das für offensichtlich gehalten :)

$$[J_3, H_0] = [L_3 + S_3, H_0] = \underbrace{[L_3, H_0]}_{\text{Da } L_3 \text{ mit } \vec{L}^2 \text{ kommutiert und } H_0 \propto \vec{L}^2 \text{ folgt das sofort (und } L_3 \propto \frac{\partial}{\partial\phi})} + \underbrace{[S_3, H_0]}_{=0\text{, weil in } H_0 \text{ kein } \vec{S} \text{ vorkommt, kommutiert mit } \vec{L} \text{ nach Konstruktion}^*} = 0 \ ✓$$

Wie argumentiert man besser dass $[S_3, H_0] = 0$ oder z.B. auch $[S_3, \frac{\partial^2}{\partial r^2} r] = 0$?

* das ist genau das richtige Argument

$[J_3, H_{LS}] = [J_3, f(r)(\vec{L}\vec{S})]$, mit $(\vec{L}+\vec{S})^2 = \vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L}\vec{S}$ folgt

$$= [J_3, f(r)\frac{\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2}{2}]$$

$$= \frac{1}{2}\{[J_3, f(r)\vec{J}^2] - [J_3, f(r)\vec{L}^2] - [J_3, f(r)\vec{S}^2]\} = 0$$

Oder hätte man das nochmal nachrechnen sollen?

nein, ist ok so

Und wir wissen bereits dass J_3 mit $\vec{J}^2, \vec{L}^2, \vec{S}^2$ kommutiert, denn $J_3 = L_3 + S_3$. Da J_3 nicht von r abhängt, kann man $f(r)$ vor den Kommutator ziehen!

Wer sagt dass J_3 nicht von r abhängt!

Naja, S_3 ja sowieso nicht und $L_3 = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$

$$[\vec{J}^2, H_0] = \underbrace{[\vec{L}^2, H_0]}_{\text{kommutiert wieder da } H_0 \propto \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \vec{L}^2} + \underbrace{[\vec{S}^2, H_0]}_{\text{kommutiert weil konstant und da } H_0 \not\propto \vec{S}} + 2[\vec{L}\cdot\vec{S}, H_0]$$

$= 2\underbrace{[\vec{L}\cdot\vec{S}, H_0]}_{=0}$; dass $\vec{L}\cdot\vec{S}$ mit $\frac{\partial^2}{\partial r^2}$ kommutiert ist trivial. Für $\vec{L}^2$ betrachten wir $[\vec{L}\cdot\vec{S}, \vec{L}^2]$ (*)

$(*) = [L_1 S_1 + L_2 S_2 + L_3 S_3, L_1^2 + L_2^2 + L_3^2]$

und da S_i jeweils mit L_j vertauscht, folgt auch das sofort.

$$[\vec{J}^2, H_{LS}] = [\vec{L}^2, H_{LS}] + [\vec{S}^2, H_{LS}] + 2\underbrace{[\vec{L}\cdot\vec{S}, H_{LS}]}_{\text{trivialerweise } =0, \text{ denn } H_{LS} \propto (\vec{L}\cdot\vec{S})}$$

$= 0$, denn

$[\vec{L}^2, \vec{L}\cdot\vec{S}] = [L_1^2 + L_2^2 + L_3^2, L_1 S_1 + L_2 S_2 + L_3 S_3] = 0$

da $[S_i, L_j] = 0$, analog für $\vec{S}^2$

Wieso kann man hier die $f(r)$ Abhängigkeit immer vernachlässigen? Also $[\vec{L}^2, f(r)\vec{L}\cdot\vec{S}] = f(r)[\vec{L}^2, \vec{L}\cdot\vec{S}]$ und analog für $\vec{S}^2$?

$f(r)$ hängt ja nicht von Winkeln oder Spin ab, also $[f(r), L_k] = [f(r), S_k] = 0$

$[\vec{L}^2, H_0]$ bereits argumentiert

$[\vec{L}^2, H_{LS}]$ auch bereits argumentiert.

2/2

Ich glaube das ist ein Tippfehler. Da sollte nur "Spinoren" stehen...

FRAGE: Auf dem Blatt steht am Anfang:

"... mit den Kugelspinoren $\chi_{1/2} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $\chi_{-1/2} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$"

wobei die neue Wellenfkt dann $\psi_{nlm_l}\chi_{m_s}$ ist.

Bei Teil a) steht dann:

"... die Kugelspinoren $\Phi_{jlm_j}(\vartheta,\varphi) = \sum_{m_l m_s} Y_{lm_l}(\vartheta,\varphi)\chi_{m_s}\underbrace{\langle l\, m_l\, \tfrac{1}{2}\, m_s | j\, m\rangle}$ ..."

$\overset{?}{=} \psi_{nlm_l}\chi_{m_s}$ in alter Basis?

Was ist denn nun richtig?

Und wo ist bei Letzterem der Radialanteil der Wellenfkt hin, also $R_{nl}(r)$? Sollen ja die Basisfkt für gesamtes Problem sein!

Das ungestörte Wasserstoffatom ist ja komplett entartet im Winkelanteil. Statt

$R_{nl}(r)\, Y_{lm_l}(\theta,\phi)\,\chi_{m_s}$ können wir also genausogut $R_{nl}(r)\,\Phi_{jlm_j}(\theta,\phi)$ als

Basisfunktionen nehmen. Wenn wir die Störung H_{LS} dazu nehmen müssen wir letztere benutzen. (Siehe auch $*_2$ auf letzter Seite.)

b) $H_{LS} = \frac{1}{2\mu^2 c^2} (\vec{L} \cdot \vec{S}) \frac{e^2}{r^3}$

Erste Ordnung Störungstheorie: $E_n^1 = \langle n^0 | H_{LS} | n^0 \rangle$

Also wollen wir dies für $\hat{n}^0 = \psi_{1s}\chi_{m_s}$ und $\hat{n}^{0'} = \psi_{2p}\chi_{m_s}$ nein! *2

Was meint „zu den ersten beiden Energieniveaus des Wasserstoffatoms"?

n = 1 und n = 2

$\Rightarrow E_1^1 = \langle \psi_{1s}\chi_{m_s} | H_{LS} | \psi_{1s}\chi_{m_s} \rangle = \frac{1 \cdot e^2}{2\mu^2 c^2} \langle \psi_{1s}\chi_{m_s} | \frac{\vec{L}\cdot\vec{S}}{r^3} | \psi_{1s}\chi_{m_s} \rangle$

$= \frac{e^2}{2\mu^2 c^2} \langle \psi_{1s}\chi_{m_s} | \frac{1}{2r^3} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) | \psi_{1s}\chi_{m_s} \rangle$

↳ keine Eigenfkten von $\vec{J}^2$

Was ist mit ψ_{2s}? Oder weil ψ_{2p} niedriger liegt? *1

$= \frac{e^2}{2\mu^2 c^2} \langle \psi_{1s}\chi_{m_s} | \frac{1}{2r^3} \{ j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \} | \psi_{1s}\chi_{m_s} \rangle$ *

Sind ψ_{1s}, ψ_{2s} und ψ_{2p} jetzt eigentlich die unkorrigierten Wellenfkt? Also ohne Störterm? D.h. wir wissen dass $n^0 \equiv \psi_{1s}$ bzw ψ_{2s} oder ψ_{2p}. Oder gilt bereits dass diese korrigiert sind, also $n^1 \equiv \psi_{1s}$ bzw $n^1 \equiv \psi_{2s}$ etc? *3

$m_s = +\frac{1}{2}$: $\frac{e^2}{2\mu^2 c^2} \langle \psi_{1s}\chi_{1/2} | \frac{1}{2r^3} \{ \frac{3}{4} - 0 - \frac{3}{4} \} | \psi_{1s}\chi_{1/2} \rangle$

$= 0$ (✓)

$m_s = -\frac{1}{2}$: $\frac{e^2}{2\mu^2 c^2} \langle \psi_{1s}\chi_{-1/2} | \frac{1}{2r^3} \{ \frac{3}{4} - 0 - \frac{3}{4} \} | \psi_{1s}\chi_{-1/2} \rangle$

$= 0$ (✓)

* Deine Rechnung ist aber richtig wenn du überall $|\psi_{1s}\chi_{m_s}\rangle$ durch $|R_{nl}\Phi_{jlm_j}\rangle$ ersetzt :)

$E_2^1 = \langle R_{21}\Phi_{jlm_j} | H_{LS} | R_{21}\Phi_{jlm_j} \rangle$ ✓ $= \frac{e^2}{2\mu^2 c^2} \langle R_{21}\Phi_{jlm_j} | \frac{1}{2r^3} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) | R_{21}\Phi_{jlm_j} \rangle$

$\begin{matrix} j=\frac{1}{2} \rightarrow \\ j=\frac{3}{2} \rightarrow \end{matrix} \left\{ \begin{matrix} \ldots \\ \ldots \end{matrix} \right\} \curvearrowright = \frac{e^2}{4\mu^2 c^2} \langle R_{21}\Phi_{jlm_j} | \frac{(\hbar^2)}{r^3} \left\{ \begin{matrix} \frac{3}{4} - 2 - \frac{3}{4} \\ \frac{15}{4} - 2 - \frac{3}{4} \end{matrix} \right\} | R_{21}\Phi_{jlm_j} \rangle$

$= \frac{e^2}{4\mu^2 c^2} \left\{ \begin{matrix} -2 \\ 1 \end{matrix} \right\} \langle R_{21}\Phi_{jlm_j} | \frac{1}{r^3} | R_{21}\Phi_{jlm_j} \rangle$

$= \frac{e^2}{4\mu^2 c^2} \left\{ \begin{matrix} -2 \\ 1 \end{matrix} \right\} \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} dr \, \frac{1}{r} \sin\theta \, R_{21}^2 \Phi^*_{jlm_j} \Phi_{jlm_j}$ → einfach $\int d\Omega \, \Phi^*\Phi = 1$

$= \frac{e^2}{4\mu^2 c^2} \left\{ \begin{matrix} -2 \\ 1 \end{matrix} \right\} \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} dr \, R_{21}^2 \frac{1}{r} \sin\theta \sum_{m_l', m_s'} Y^*_{lm_l'} \chi_{m_s'} \langle l m_l' \tfrac{1}{2} m_s' | j m \rangle^*$
$\cdot \sum_{m_l, m_s} Y_{lm_l} \chi_{m_s} \langle l m_l \tfrac{1}{2} m_s | j m \rangle$

$\iint Y^*_{lm}(\theta,\varphi) Y_{l'm'}(\theta,\varphi) \, d\Omega = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$ und $\chi_{m_s} \cdot \chi_{m_s^*} = \delta_{m_s m_s^*}$

$= \frac{e^2}{4\mu^2 c^2} \left\{ \begin{matrix} -2 \\ 1 \end{matrix} \right\} \frac{1}{3(2a_0)^3} \frac{1}{a_0^2} \int_0^{\infty} dr \, r e^{-r/a_0} \underbrace{\sum_{m_l, m_s} \langle l m_l \tfrac{1}{2} m_s | j m \rangle^2}$

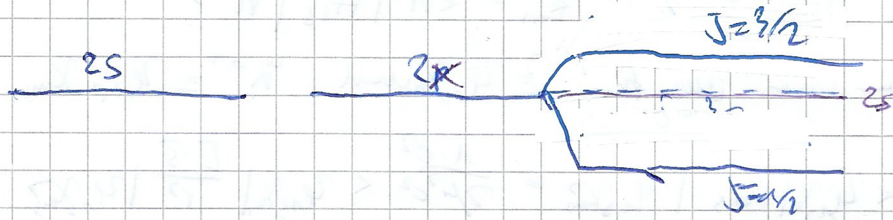
$= \frac{e^2}{2 4\mu^2 c^2} \left\{ \begin{matrix} -2 \\ 1 \end{matrix} \right\} \frac{1}{2a} \frac{1}{a_0^5} \left\{ -a_0 r e^{-r/a_0} \Big|_0^{\infty} + a_0 \int_0^{\infty} e^{-r/a_0} dr \right\}$, setze $\sum (*) = 1$,

(*) = 1 nur für Kopplung 2-Teilchen C.G.C und für C.G.C für L-S Kopplung?

$= \frac{e^2}{96\mu^2 c^2 a_0^3} \left\{ \begin{matrix} -2 \\ 1 \end{matrix} \right\} \{ (1) \} = + \frac{e^2 (\hbar^2)}{96\mu^2 c^2 a_0^3} \left\{ \begin{matrix} -2 \\ 1 \end{matrix} \right\} \begin{matrix} \leftarrow j = \frac{1}{2} \\ \leftarrow j = \frac{3}{2} \end{matrix}$ ✓

In eV einfach durch e teilen. =

Aufspaltung sieht so aus



(v)

4/5

Was für Werte einsetzen für μ, a_0 etc?

*1 2s sollte man auch betrachten. (Da gibt es in erster Ordnung keine Energieverschiebung.)

2s und 2p haben für das ungestörte Wasserstoffatom natürlich die selbe Energie.

Die gehören also beide zum 2. Energieniveau.

*2 Der Punkt ist, dass wir es jetzt mit Entartung zu tun haben. Deswegen müssen wir diejenigen Eigenfunktionen nehmen, in denen H_{fs} (in dem entsprechenden Unterraum) diagonal ist. Also in diesem Fall nicht mehr $\psi_{n\ell m_\ell} \chi_{m_s}$ sondern $R_{n\ell} \phi_{j\ell m_j}$.

m_ℓ und m_s sind keine guten Quantenzahlen mehr!

*3 In die Formel (4) müssen die ungestörten Funktionen, also $R_{n\ell} \phi_{j\ell m_j}$ (siehe auch *2).