13. Tutorium

Montag, 31. Januar 2022 18:57

Addition von Drehimpulsen

- Viele Anwendungen:
  - ↳ Spin-Bahn Kopplung in Atomen
  - ↳ Mehrelektronenatome / Moleküle
  - ↳ Hyperfeinstrukturwechselwirkung mit Spin des Kerns

- Ausgangspunkt: Zwei Drehimpulse z.B. Bahndrehimpuls $\hat{L}$ und Spin $\hat{S}$
  ↳ gleiche Eigenzustände, kommutieren miteinander

$$\hat{L}^2 |l s m_l m_s\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l s m_l m_s\rangle$$
$$\hat{L}_z |l s m_l m_s\rangle = \hbar m_l |l s m_l m_s\rangle$$
$$\hat{S}^2 |l s m_l m_s\rangle = \hbar^2 s(s+1) |l s m_l m_s\rangle$$
$$\hat{S}_z |l s m_l m_s\rangle = \hbar m_s |l s m_l m_s\rangle$$

Definiere nun Gesamtdrehimpuls $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ mit $\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{S}\hat{L}$, $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$

Frage: Welche Quantenzahlen beschreiben meinen Gesamtzustand?
↳ System kommutierender Observablen wird benötigt!

zunächst sehen wir: $[\hat{J}^2, \hat{L}^2] = \underbrace{[\hat{L}^2, \hat{L}^2]}_{0} + \underbrace{[\hat{S}^2, \hat{L}^2]}_{=0,\text{ da } \hat{L} \text{ und } \hat{S} \text{ kommutieren}} + 2\underbrace{[\hat{S}\hat{L}, \hat{L}^2]}_{= \hat{S}\underbrace{[\hat{L}, \hat{L}^2]}_{=0} + \underbrace{[\hat{S}, \hat{L}^2]}_{=0}\hat{L}} = 0$

analog gilt $[\hat{J}^2, \hat{S}^2] = 0$

allerdings haben wir ein Problem: $[\hat{J}^2, \hat{L}_z] = -[\hat{J}^2, \hat{S}_z] \neq 0$ *
⇒ der Kommutator verschwindet nicht. ↳ siehe Aufgabe 12.1 der ÜS

allerdings kommutieren $\hat{J}^2$ und $\hat{J}_z$: $[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = [\hat{J}^2, \hat{L}_z] + [\hat{J}^2, \hat{S}_z] \overset{*}{=} 0$

⇒ wir können also doch vier neue, kommutierende Observablen angeben: $\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2$

Es gilt nun:
$$\hat{J}^2 |j m_j l s\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j m_j l s\rangle$$
$$\hat{J}_z |j m_j l s\rangle = \hbar m_j |j m_j l s\rangle$$

⇒ wir haben also zwei Basen die das System im gekoppelten oder ungekoppelten Zustand beschreiben

ungekoppelt $\{\hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z\} \Rightarrow |l s m_l m_s\rangle$
gekoppelt $\{\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2\} \Rightarrow |j m_j l s\rangle$

Frage: Wie wechselt man nun von einer Basis in die andere?
neue Notation: Umbenennung von $\hat{L}$ und $\hat{S}$ zu $\hat{j}_1$ und $\hat{j}_2$

Es gilt allgemein (Vollständigkeit)
$$|j\, m_j\, j_1 j_2\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2\, m_1 m_2\rangle \underbrace{\langle j_1 j_2\, m_1 m_2 | j\, m_j\, j_1\, j_2\rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-Koeffizienten}}$$

Berechnung nicht trivial (Wolfram Alpha hilft)

Beispiel: Addition zweier Spins mit $s = \frac{1}{2}$

- Wir betrachten zwei Spin 1/2-Teilchen mit $\hat{S}_1$ und $\hat{S}_2$ $\qquad \hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$
- Der Zustandsraum enthält folgende Basisvektoren:

$$|+,+\rangle,\ |+-\rangle,\ |-+\rangle,\ |--\rangle$$

- für den Gesamtspin gibt es zwei Möglichkeiten:

$s = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$: Triplettzustand mit $|s, m_s\rangle = |1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle$

$s = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$: Singulettzustand mit $|s, m_s\rangle = |0,0\rangle$

- Aufgabe: Berechne die Zustände in der „$|+-\rangle$" Basis

Für $s = 1$ und $m_s = \pm 1$ gilt $\quad |1,1\rangle = |++\rangle$ wegen $S_z = S_{z1} + S_{z2} = 1$

$|1,-1\rangle = |--\rangle \qquad S_z = S_{z1} + S_{z2} = -1$

Der Zustand $|1,0\rangle$ ist nicht mehr so einfach. Im Allgemeinen handelt es sich um eine Superposition
$$|1,0\rangle = a|+-\rangle + b|-+\rangle$$

Wie in der Übungsserie brauchen wir jetzt den Leiteroperator
$$\hat{j}_\pm |j\, m\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\ |j\ (m\pm 1)\rangle$$

$$\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}$$

$$(\hat{j}_x - i\hat{j}_y)\cdot(\hat{j}_x + i\hat{j}_y)$$

Herleitung mithilfe von $\hat{j}_- \hat{j}_+ = \hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 - \hbar \hat{j}_z$

$$|\alpha|^2 = \langle j\, m | \hat{j}_- \hat{j}_+ | j\, m\rangle = \langle j\, m | \hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 - \hbar \hat{j}_z | j\, m\rangle$$
$$= \hbar^2 [j(j+1) - m^2 - m]$$

$$\Rightarrow \quad S_- = S_{1-} + S_{2-}$$
$$S_- |1,1\rangle = \hbar\sqrt{(1+1)(1-1+1)}\ |1,0\rangle = \hbar\sqrt{2}\ |1,0\rangle$$

$$S_- |++\rangle = S_{1-}|++\rangle + S_{2-}|++\rangle$$
$$= \hbar \sqrt{\left(\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2}\right)\left(\tfrac{1}{2}-\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{2}\right)}\,\big(|-+\rangle + |+-\rangle\big) = \hbar\,\big(|-+\rangle + |+-\rangle\big)$$

$\Rightarrow$ Im Vergleich erhalten wir mit $|1,1\rangle = |++\rangle$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|+-\rangle + |-+\rangle\big)$$

Zur Bestimmung des Singulett Terms treffen wir einen ähnlichen Ansatz:

$$|0,0\rangle = c\,|+-\rangle + d\,|-+\rangle$$

Zudem muss dieser Zustand orthogonal auf auf $|1,0\rangle$ stehen
Damit ergibt sich mit der Normierungsbedingung:

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|+-\rangle - |-+\rangle\big)$$

Störungsrechnung (zeitunabhängig)

1.) Eigenwerte und -zustände im ungestörten Zustand sind bekannt $\hat{H}_0 |E_n^{(0)}\rangle = E_n |E_n^{(0)}\rangle$

2.) Gesamt-Hamilton Operator $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_{St}$

3.) $\lambda \to 0$ $\quad \lim_{\lambda\to 0} |E_n(\lambda)\rangle = |E_n^{(0)}\rangle \quad \lim_{\lambda\to 0} E_n(\lambda) = E_n^{(0)}$

$$|E_n(\lambda)\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} \lambda_n^i \, |E_n^{(i)}\rangle$$

Energiekorrektur 1. Ordnung: $\boxed{E_n^{(1)} = \langle E_n^{(0)} | \hat{H}_{St} | E_n^{(0)}\rangle}$

Beispiel: Stark-Effekt: $\hat{H}_{St} = \mathcal{E}\cdot\hat{x}$
Harm. Oszillator

$$E_n^{(1)} = \mathcal{E}\,\langle E_n^{(0)} | \hat{x} | E_n^{(0)}\rangle = \mathcal{E}\,\langle n|\hat{x}|n\rangle = \frac{\mathcal{E}}{2k}\langle n|\hat{a}+\hat{a}^\dagger|n\rangle = \ldots = 0$$

$$\hat{x} = \frac{1}{2k}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger) \qquad k = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}$$

Zustandskorrektur 1. Ordnung: $\boxed{|E_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{\langle E_m^{(0)}|\hat{H}_{St}|E_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\,|E_m^{(0)}\rangle}$

Energiekorrektur 2. Ordnung: $\boxed{E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n}^{\infty} \frac{|\langle E_m^{(0)}|H_{St}|E_n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}}$