Übungsblatt 3

Aufgabe 1

a) $a = \frac{1}{\sqrt{2\omega m \hbar}}(\omega m \hat{x} + i\hat{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha\hat{x} + \frac{i}{\hbar\alpha}\hat{p}\right) \quad ; \ \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$

$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha\hat{x} - \frac{i}{\hbar\alpha}\hat{p}\right)$

schnelle Variante:

$\Rightarrow \ \hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(a + a^+) \quad ; \quad \hat{p} = \frac{i\hbar\alpha}{\sqrt{2}}(a^+ - a)$

$\hat{x}$: $\langle m|\hat{x}|n\rangle = \langle m|\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(a+a^+)|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\langle m|n-1\rangle\sqrt{n} + \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle =$

$= \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\left(\sqrt{n}\,\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}\right) = x_{mn}$ (m-Zeile, n-Spalte)

$\Rightarrow$ $\hat{x}$ in Matrixdarstellung

$$\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\cdot\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \sqrt{5} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \sqrt{5} & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

es stehen nur Einträge in den Nebendiagonalelementen

$\hat{p}$: $\langle m|\hat{p}|n\rangle = \langle m|\frac{i\hbar\alpha}{\sqrt{2}}(a^+ - a)|n\rangle = \frac{i\hbar\alpha}{\sqrt{2}}\langle m|n+1\rangle\sqrt{n+1} - \frac{i\hbar\alpha}{\sqrt{2}}\langle m|n-1\rangle\sqrt{n} =$

$= \frac{i\hbar\alpha}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1} - \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}\right) = p_{mn}$

$\Rightarrow$ $\hat{p}$ in Matrixdarstellung

$$\frac{i\hbar\alpha}{\sqrt{2}}\cdot\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{4} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & -\sqrt{5} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \sqrt{5} & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

wieder entstehen nur Einträge in den Nebendiagonalelementen

Die langsamere Methode mit den angegebenen Relationen führt natürlich auf das Gleiche, dauert aber eben länger.

Das Matrixelement wird dann einfach berechnet:

$$x_{mn} = \langle m|\hat{x}|n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_m^*(x)\, x\, \psi_n(x) = \dots$$

b) Die Erwartungswerte $\langle\hat{x}\rangle$ und $\langle\hat{p}\rangle$ für den n-ten angeregten Zustand ist:

$$\langle\hat{x}\rangle_n = \langle n|\hat{x}|n\rangle =$$

$$= \underset{\substack{\uparrow \\ \text{n-te Stelle}}}{(0, 0, \dots, 1, 0, 0, \dots)} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & \cdots & & \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \cdots & \\ \vdots & \sqrt{2} & 0 & \ddots & \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & \\ \vdots & \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{array}{l} \\ \\ \leftarrow \text{n-te Zeile} \\ \\ \\ \end{array} = 0$$

$$\langle\hat{p}\rangle_n = \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0$$

wobei dies auch wieder 0 ist, da die $\hat{p}$-Matrix keine Diagonalelemente enthält

c) Wie in b) gesehen gilt: $\langle\hat{x}\rangle^2 = \langle\hat{p}\rangle^2 = 0$

Wir können nun $(\Delta x)^2$ (bzw. $(\Delta p)^2$) ausrechnen, indem wir die Matrix für $\hat{x}$ (bzw. $\hat{p}$) quadrieren; Dabei müssen wir nur die Diagonalelemente angeben, weil dies die einzigen sind, die für den Erwartungswert des n-ten Zustands eine Rolle spielen.

$$\hat{x}^2 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots & & & \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & & & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \ddots & & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \sqrt{n} & & \\ \vdots & & & \sqrt{n} & 0 & \sqrt{n+1} & \\ & & & & \sqrt{n+1} & \ddots & \ddots \\ & & & & & \ddots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & \cdots & & & & \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \cdots & & & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \ddots & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \sqrt{n} & & \\ \vdots & \vdots & & \sqrt{n} & 0 & \sqrt{n+1} & \\ & & & & \sqrt{n+1} & \ddots & \ddots \\ & & & & & \ddots & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{1}^2 & 0 & & & \\ & (\sqrt{1}^2+\sqrt{2}^2) & & ? & \\ \cancel{0} & & (\sqrt{2}^2+\sqrt{3}^2) & & \\ ? & & & \ddots & \\ & & & & \sqrt{n}^2+\sqrt{n+1}^2 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{2\alpha^2}$$

Wir können $\langle \hat{x}^2 \rangle_n$ aber auch über die Operatordarstellung berechnen:

$$\langle n | \left(\frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha} (a^+ + a) \right)^2 | n \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha} \right)^2 \left(\langle n | a^{+2} + a^+ a + a a^+ + a^2 | n \rangle \right) =$$

$$= \frac{1}{2\alpha^2} \left[\langle n | a^+ a | n \rangle + \langle n | a a^+ | n \rangle \right]$$

die anderen Terme fallen weg (a^{+2} und a^2 machen aus $|n\rangle$ $|n+2\rangle$ und $|n-2\rangle$)

$$\Rightarrow \langle \hat{x}^2 \rangle_n = \frac{1}{2\alpha^2} \left[\sqrt{n} \langle n | a^+ | n-1 \rangle + \langle n | a | n+1 \rangle \sqrt{n+1} \right] =$$

$$= \frac{1}{2\alpha^2} \left[\sqrt{n}^2 + \sqrt{n+1}^2 \right] = \frac{1}{2\alpha^2} (n + n + 1) = \frac{1}{2\alpha^2} (2n+1) = (\Delta x)_n^2$$

Für $\langle \hat{p}^2 \rangle_n$ können wir wieder die Diagonalelemente aus der Matrixmultiplikation ablesen. Wie man sieht, ist die Operatormethode aber eleganter und einfacher.

$$\langle n | \left(\frac{i\hbar\alpha}{\sqrt{2}} (a^+ - a) \right)^2 | n \rangle = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2} \langle n | a^{+2} - a^+ a - a a^+ + a^2 | n \rangle =$$

$$= -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2} \left(-n - (n+1) \right) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2} (2n+1) = (\Delta p)_n^2$$

Diese Aufgabe sollte zeigen, dass man Operatoren tatsächlich als Matrizen behandeln kann

d) $$(\Delta x)_n (\Delta p)_n = \frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha} \sqrt{2n+1} \; \frac{\hbar\alpha}{\sqrt{2}} \sqrt{2n+1} = \frac{\hbar}{2} (2n+1) \geq \frac{\hbar}{2} \quad \forall n$$

$\Rightarrow$ Unschärferelation erfüllt.

Übungsblatt 3

Aufgabe 2

$$\hat{L}^2 |l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)\, |l,m\rangle \quad ; \quad \hat{L}_z |l,m\rangle = \hbar m\, |l,m\rangle$$

a) $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \qquad \hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y$

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = [\hat{L}_x + i\hat{L}_y, \hat{L}_x - i\hat{L}_y] = [\hat{L}_x, \hat{L}_x] - i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] + i[\hat{L}_y, \hat{L}_x] - [\hat{L}_y, \hat{L}_y] =$$

$$= \hbar \hat{L}_z + \hbar \hat{L}_z = 2\hbar \hat{L}_z$$

b) $\hat{L}_\pm |l,m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)}\; |l, m\pm 1\rangle$

$$\hat{L}_x = \cancel{\hbar}\, \frac{1}{2}(\hat{L}_+ + \hat{L}_-)$$

$$\hat{L}_x |1,1\rangle = \frac{1}{2}\left(0 + \hbar\sqrt{1(1+1)}\, |1,0\rangle\right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} |1,0\rangle$$

$$\hat{L}_x |1,0\rangle = \frac{1}{2}\left(\hbar\sqrt{1(1+1)}\, |1,1\rangle + \hbar\sqrt{1(1+1)}\, |1,-1\rangle\right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\left(|1,1\rangle + |1,-1\rangle\right)$$

$$\hat{L}_x |1,-1\rangle = \frac{1}{2}\left(\hbar\sqrt{1(1+1)}\, |1,0\rangle + 0\right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} |1,0\rangle$$

Es gibt natürlich nur 3 verschiedene Werte, denn $-l \leq m \leq l$

c) hier muss nun etwas aufgepasst werden, denn z.B.:

0.te Zeile:

$\langle 1,1|\hat{L}_x|1,1\rangle \mathrel{\hat{=}} L_{x,00}$ also dem Eintrag in der 0.ten Zeile und 0.ten Spalte.

also: $\langle 1,1|\hat{L}_x|1,1\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \langle 1,1|1,0\rangle = 0$

$\langle 1,1|\hat{L}_x|1,0\rangle \mathrel{\hat{=}} L_{x,01} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\left(\langle 1,1|1,1\rangle + \langle 1,1|1,-1\rangle\right) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}$

$\langle 1,1|\hat{L}_x|1,-1\rangle \mathrel{\hat{=}} L_{x,02} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \langle 1,1|1,0\rangle = 0$

1.te Zeile:

$\langle 1,0|\hat{L}_x|1,1\rangle \mathrel{\hat{=}} L_{x,10} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \langle 1,0|1,0\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}$

$\langle 1,0|\hat{L}_x|1,0\rangle \mathrel{\hat{=}} L_{x,11} = 0$

$\langle 1,0|\hat{L}_x|1,-1\rangle \mathrel{\hat{=}} L_{x,12} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}$

2. Zeile: $\langle 1,-1|\hat{L}_x|1,-1\rangle = 0$

Der Operator $\hat{L}_x$ ist hermitisch, d.h.: $(L_x^+)_{ij} = L^*_{x,ji} = (L_x)_{ij}$

Deshalb müssen wir eigentlich nur die Matrixelemente oberhalb und auf der Diagonalen berechnen

So ergibt sich der $\hat{L}_x$-Operator in Matrixdarstellung zu:

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Diese Darstellung gilt bzgl. der Basis der $\hat{L}_z$ - Eigenzustände (*)

Jetzt sollen noch die Eigenwerte und Eigenvektoren berechnet werden

1. Berechnung der Eigenwerte:

$$\det|\hat{L}_x - \lambda \mathbb{1}| = 0 \quad \Rightarrow \quad \det \left| \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right| =$$

$$= \det \left| \begin{pmatrix} -\lambda & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & -\lambda & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & -\lambda \end{pmatrix} \right| = -\lambda^3 + \frac{\hbar^2}{2}\lambda + \frac{\hbar^2}{2}\lambda = 0$$

$$\Rightarrow \lambda^3 - \hbar^2 \lambda = 0 \qquad \Rightarrow \lambda_1 = 0$$

$$\lambda^2 - \hbar^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda_{2,3} = \pm \hbar$$

2. Berechnung der Eigenvektoren:

$$\lambda = +\hbar: \quad \begin{pmatrix} -\hbar & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & -\hbar & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & -\hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ? \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \begin{pmatrix} ? \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = v_1$$

muss noch normiert werden: $v_1 = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}$

$$\lambda = -\hbar: \quad \begin{pmatrix} \hbar & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & \hbar & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & \hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ? \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \begin{pmatrix} ? \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = v_2$$

normiert: $v_2 = \begin{pmatrix} -1/2 \\ 1/\sqrt{2} \\ -1/2 \end{pmatrix}$

$$\lambda = 0: \quad \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ? \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} ? \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = v_3$$

normiert: $$v_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Man sieht gleich, dass alle Vektoren orthonormal sind, sie bilden eine neue Basis.

Außerdem sind v_1, v_2, v_3 natürlich Eigenvektoren zu $\hat{L}_x$ in (*) mit den Eigenwerten $\hbar, -\hbar, 0$.

Wir können deshalb auch ein neues Basissystem einführen und schreiben:

$v_1 = |1,1\rangle$; $v_2 = |1,-1\rangle$, $v_3 = |1,0\rangle$

$$\hat{L}_x = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad v_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\hat{L}_z$ ist in diesem Basissystem dann nicht mehr diagonal.

Übungsblatt 3

Aufgabe 3

$g=2$: $\quad H = -\vec{\mu}\vec{B} = \frac{\hbar e_0 B}{2m_e}\sigma_z = \frac{\hbar e_0 B}{2m_e}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$

a) Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\chi(t) = H\chi(t)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix} = \frac{\hbar e_0 B}{2m_e}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad i\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix} = \omega\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix} \qquad \omega = \frac{e_0 B}{2m_e}$$

I: $\dot{a}(t) = -i\omega a(t)$

II: $\dot{b}(t) = +i\omega b(t)$

$$\Rightarrow \quad \chi(t) = \begin{pmatrix}a_0 e^{-i\omega t}\\ b_0 e^{i\omega t}\end{pmatrix}$$

$\chi(t=0)$ ist Eigenzustand zu s_x

$\sigma_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$: Um Eigenzustände zu bekommen, muss σ_x diagonalisiert werden

$$\det\left|\begin{pmatrix}-\lambda & 1\\ 1 & -\lambda\end{pmatrix}\right| = \lambda^2 - 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = \pm 1$$

$\lambda = +1 \quad \hat{=}$ Eigenwert $\frac{\hbar}{2}$ für s_x, denn $s_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$

$$\begin{pmatrix}-1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}?\\ ?\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\ 0\end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \text{Eigenvektor: } \begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix} \xrightarrow{\text{normiert}} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}$$

d.h. $\chi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \quad a_0 = 1/\sqrt{2}\ ;\ b_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \Rightarrow \quad \chi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}e^{-i\omega t}\\ e^{i\omega t}\end{pmatrix}$$

b)

$$\langle \chi(t) | \sigma_z | \chi(t) \rangle = \frac{1}{2} \left(e^{i\omega t}, e^{-i\omega t} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{2} \left(e^{i\omega t}, e^{-i\omega t} \right) \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ -e^{i\omega t} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (1 - 1) = 0$$

Der Erwartungswert ist als Null, d.h. aber natürlich nicht, dass man einen Zustand mit $s_z = 0$ messen kann. Bei jeder Messung, kann s_z entweder + oder - $\frac{\hbar}{2}$ sein. Bei vielen Messungen, wird man genausooft $s_z = +\frac{\hbar}{2}$ wie $s_z = -\frac{\hbar}{2}$ messen. Deshalb ist der Erwartungswert Null.

Übungsblatt 3

Aufgabe 4

$$H = H_0 + H_1 \; , \; H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(r) \; , \; H_1 = \frac{1}{2m^2c^2r}\frac{dV}{dr}\vec{L}\cdot\vec{S} \; , \; V(r) = -\frac{e^2}{r}$$

a) Zunächst: $[\vec{L}, \vec{S}] = 0$, denn diese Operatoren wirken in unterschiedlichen Hilberträumen.

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad \Rightarrow \quad \vec{J}^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L}\vec{S}$$

$$[\hat{H}, \vec{J}^2] = [H_0 + \frac{1}{2m^2c^2r}\frac{dV}{dr}\vec{L}\vec{S}, \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L}\vec{S}] =$$

$$= \underbrace{[H_0, \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L}\vec{S}]}_{=0} + [\frac{1}{2m^2c^2r}\frac{dV}{dr}\vec{L}\vec{S}, \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L}\vec{S}] \overset{!}{=} 0$$

denn H_0 hängt nur von $\vec{L}^2$ ab, und das kommutiert natürlich mit $\vec{L}^2, \vec{S}^2$ und $\vec{L}\vec{S}$

kommutiert jeweils

damit ist auch klar: $[\hat{H}, \vec{L}^2] = [\hat{H}, \vec{S}^2] = 0$

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$$

$[H_0, \hat{J}_z] = [H_0, \hat{L}_z + \hat{S}_z] = 0$, denn in H_0 steckt nur $\vec{L}^2$ und dies kommutiert mit $\hat{L}_z$ und $\hat{S}_z$

$$[\hat{H}_1, \hat{J}_z] = [\frac{1}{2m^2c^2r}\frac{dV}{dr}\vec{L}\vec{S}, \hat{L}_z + \hat{S}_z] = \text{"const"}[\vec{L}\vec{S}, \hat{L}_z + \hat{S}_z] =$$

$$= [L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z, L_z + S_z] = [L_x S_x, L_z] + [L_y S_y, L_z] + [L_z S_z, L_z] +$$

$$+ [L_x S_x, S_z] + [L_y S_y, S_z] + [L_z S_z, S_z] =$$

$$= -i\hbar L_y S_x + i\hbar L_x S_y + 0 + (-i\hbar L_x S_y) + i\hbar L_y S_x + 0 = 0$$

damit sind alle gewünschten Relationen gezeigt.

Außerdem wurde verwendet: $[L_i, L_j] = \varepsilon_{ijk} i\hbar L_k$

b) $$\vec{J}^2 = (\vec{L}+\vec{S})^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L}\vec{S}$$

$$\Rightarrow \vec{L}\vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$$

$$\vec{L}\vec{S}\,|j,l,s,m_j\rangle = \frac{1}{2}(\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 s(s+1))\,|j,l,s,m_j\rangle =$$
$$= \frac{\hbar^2}{2}\left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right)|j,l,s,m_j\rangle$$

c)

$$\Delta E = \langle njlsm_j|H_1|njlsm_j\rangle =$$
$$= \int_0^\infty dr\, r^2 \langle njlsm_j|r\rangle \langle r|H_1|njlsm_j\rangle =$$
$$= \int_0^\infty dr\, r^2\, R_{nl}^*(r)\frac{1}{2m^2c^2 r}\frac{dV}{dr}R_{nl}(r)\,\langle jlsm_j|\vec{L}\vec{S}|jlsm_j\rangle =$$
$$= \frac{e^2\hbar^2}{4m^2c^2}\left(j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right)\int_0^\infty dr\, r^2 \frac{1}{r^3} R_{nl}^*(r)\, R_{nl}(r) =$$

Man beachte: $|j,l,s,m_j\rangle$ sind natürlich orthonormiert.

1s-Zustand:

$1s_{1/2}$ $\quad j=1/2\,;\ l=0\,;\ s=1/2 \Rightarrow \Delta E = 0$ $\quad (n=1)$

2s-Zustand:

$2s_{1/2}$ $\quad j=1/2\,;\ l=0\,;\ s=1/2 \Rightarrow \Delta E = 0$ $\quad (n=2)$

2p-Zustand:

$2p_{1/2}\,;\ 2p_{3/2}$ $\quad j=1/2\,;\ j=3/2\,;\ l=1\,;\ s=1/2 \Rightarrow \Delta E \neq 0$ $\quad (n=2)$

$$\Delta E(2p) = \frac{e^2\hbar^2}{4m^2c^2}\left(j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right)\int_0^\infty dr\,\frac{1}{r}\left(\frac{r}{\sqrt{24}\,a_0^{5/2}}e^{-\frac{r}{2a_0}}\right)^*\left(\frac{r}{\sqrt{24}\,a_0^{5/2}}e^{-\frac{r}{2a_0}}\right) =$$
$$= \frac{e^2\hbar^2}{4m^2c^2}\left(j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right)\int_0^\infty dr\, r\,\frac{1}{24a_0^5}\,e^{-\frac{r}{a_0}} =$$
$$= \frac{1}{96}\frac{e^2\hbar^2}{m^2c^2a_0^3}\left(j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right)$$

1. $j=3/2 \Rightarrow \Delta E(2p_{3/2}) = \frac{1}{96}\frac{e^2\hbar^2}{m^2c^2a_0^3}$
2. $j=1/2 \Rightarrow \Delta E(2p_{1/2}) = -\frac{2}{96}\frac{e^2\hbar^2}{m^2c^2a_0^3}$

Zusatz: (muss nicht in der Übung behandelt werden):

Man kann die Störungsrechnung auch allgemein durchführen:

$$\Delta E = \langle n,j,l,s,m_j | H_1 | n,j,l,s,m_j \rangle = \langle H_1 \rangle = \left\langle \frac{1}{2m^2c^2 r} \frac{d}{dr}\left(-\frac{e^2}{r}\right) \vec{L}\vec{S} \right\rangle =$$

$$= \frac{e^2}{2m^2c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \langle \vec{L}\vec{S} \rangle$$

Wir berechnen zunächst $\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle$ und verwenden dazu das Ehrenfestsche - Theorem:

$$m \frac{d^2\langle x \rangle}{dt^2} = \frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle$$

Wir wollen Störungstheorie betreiben, deshalb bilden wir den Erwartungswert $\langle p \rangle$ bzgl.

Eigenfunktionen zum Wasserstoffatom:

$$\langle n,l,j,s,m_j | \hat{p} | n,l,j,s,m_j \rangle_t = \underbrace{e^{+i\frac{E_j}{\hbar}} e^{-i\frac{E_j}{\hbar}}}_{=1} \langle n,l,j,s,m_j | \hat{p} | n,l,j,s,m_j \rangle = \text{zeitunabhängig}$$

$$\Rightarrow \frac{d\langle \vec{p} \rangle}{dt} = 0 = -\langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle$$

$$\vec{\nabla} V(\vec{x}) = \frac{\partial}{\partial r}\left(-\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right) = \frac{e^2}{r^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{2l(l+1)}{r^3}$$

$$\langle \vec{\nabla} V(\vec{x}) \rangle = 0 \Rightarrow \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{e^2 m}{\hbar^2 l(l+1)} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle$$

Nebenrechnung: $H(\alpha)\, u_\alpha = E(\alpha)\, u_\alpha$

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = \frac{\partial}{\partial \alpha} \int d^3r\, u_\alpha^* H(\alpha) u_\alpha = \int d^3r \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} u_\alpha^*\right) H_\alpha u_\alpha + \int d^3r\, u_\alpha^* \frac{\partial H_\alpha}{\partial \alpha} u_\alpha + \int d^3r\, u_\alpha^* H_\alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} u_\alpha =$$

$$= E_\alpha \int d^3r \frac{\partial}{\partial \alpha}(u_\alpha^* u_\alpha) + \left\langle \frac{\partial H_\alpha}{\partial \alpha} \right\rangle \quad \text{(folgt daraus, dass } \hat{H} \text{ hermitisch ist)}$$

$$= \frac{\partial}{\partial \alpha} \underbrace{\int d^3r\, u_\alpha^* u_\alpha}_{=1} + \left\langle \frac{\partial H}{\partial \alpha} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \alpha} \right\rangle$$

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2 n^2} = -\frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2 (N+l+1)^2} \qquad n = N+l+1$$

$$\frac{\partial E_{n,l}}{\partial l} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial l} \right\rangle = \frac{m}{(N+l+1)^3} \frac{e^4}{\hbar^2} = \left\langle \frac{\partial}{\partial l} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{e^2}{r} \right] \right\rangle =$$

$$= \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \frac{\hbar^2 (2l+1)}{2m} \Rightarrow \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{e^4 m^2}{\hbar^4 (l+\frac{1}{2}) n^3}$$

$$\Rightarrow \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{e^2 m}{\hbar^2 l(l+1)} \frac{e^4 m^2}{\hbar^4 (l+\frac{1}{2}) n^3} = \frac{m^3 e^6}{\hbar^6} \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1) n^3}$$

$$\Rightarrow \Delta E_{nl} = \frac{m^3 e^8}{4 m^2 c^2 \hbar^4} \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1) n^3} \begin{cases} l & j = l+\frac{1}{2} \\ -(l+1) & j = l-\frac{1}{2} \end{cases}$$

mit $a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m}$ $\Rightarrow \Delta E_{nl} = \frac{e^2 \hbar^2}{4 m^2 c^2 a_0^3} \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1) n^3} \begin{cases} l & j = l+\frac{1}{2} \\ -(l+1) & j = l-\frac{1}{2} \end{cases}$

für $l=0$ ist dies natürlich problematisch, aber

$\Delta E(2p_{3/2}) = \frac{1}{96} \frac{e^2 \hbar^2}{m^2 c^2 a_0^3}$; $\Delta E(2p_{1/2}) = -\frac{2}{96} \frac{e^2 \hbar^2}{m^2 c^2 a_0^3}$

d) Es soll die Energieaufspaltung des Zustandes $2p_{1/2}$ berechnet werden.

Aufgespalten wird zwischen $m_j = -1/2$ und $m_j = +1/2$

$$\Lambda_{1,1/2,1/2}(\theta,\phi) = -\left(\frac{1}{3}\right)^{1/2} Y_{1,0}(\theta,\phi)\,\chi_{1/2,1/2} + \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} Y_{1,1}(\theta,\phi)\,\chi_{1/2,-1/2} =$$

$$= -\left(\frac{1}{3}\right)^{1/2} |1,0\rangle|\uparrow\rangle + \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} |1,1\rangle|\downarrow\rangle$$

$$\Lambda_{1,1/2,-1/2}(\theta,\phi) = -\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} Y_{1,-1}(\theta,\phi)\,\chi_{1/2,1/2} + \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2} Y_{1,0}(\theta,\phi)\,\chi_{1/2,-1/2} =$$

$$= -\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} |1,-1\rangle|\uparrow\rangle + \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2} |1,0\rangle|\downarrow\rangle$$

$m_j = +1/2$

$\Delta E_{1/2} = \langle n, 1/2, 1, 1/2, 1/2 | \hat{H}_2 | n, 1/2, 1, 1/2, 1/2 \rangle =$ ($\hat{H}_2$ hängt nicht von r ab $\Rightarrow$

Der radiale Anteil muss nicht beachtet werden, weil er normiert ist)

$$= \langle 1/2, 1, 1/2, 1/2 | \frac{e}{2mc} B(L_z + 2S_z) | 1/2, 1, 1/2, 1/2 \rangle =$$

$$= \left(-\left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}\langle 1,0|\langle\uparrow| + \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}\langle 1,1|\langle\downarrow|\right) \frac{e}{2mc} B(L_z + 2S_z) \left(\left(-\frac{1}{3}\right)^{1/2}|1,0\rangle|\uparrow\rangle + \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}|1,1\rangle|\downarrow\rangle\right) =$$

$$= \left(-\left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}\langle 1,0|\langle\uparrow| + \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}\langle 1,1|\langle\downarrow|\right) \frac{e}{2mc} B \left(-2\left(+\frac{1}{3}\right)^{1/2}|1,0\rangle|\uparrow\rangle\frac{\hbar}{2} + \hbar\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}|1,1\rangle|\downarrow\rangle + 2\left(-\frac{\hbar}{2}\right)\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}|1,1\rangle|\downarrow\rangle\right) =$$

$$= \frac{e}{2mc} B \left[2 \cdot \frac{\hbar}{2}\left(\frac{1}{3}\right) + \hbar\left(\frac{2}{3}\right) - \hbar\left(\frac{2}{3}\right)\right] = \frac{1}{3}\frac{e\hbar}{2mc} B$$

$m_j = -1/2$

$$\Delta E_{-1/2} = \langle 1/2, 1, 1/2, -1/2 | \frac{e}{2mc} B(L_z + 2S_z) | 1/2, 1, 1/2, -1/2 \rangle =$$

$$= \left(-\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}\langle 1,-1|\langle\uparrow| + \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}\langle 1,0|\langle\downarrow|\right) \frac{e}{2mc} B(L_z + 2S_z) \left(-\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}|1,-1\rangle|\uparrow\rangle + \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}|1,0\rangle|\downarrow\rangle\right) =$$

$$= \left(-\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}\langle 1,-1|\langle\uparrow| + \left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}\langle 1,0|\langle\downarrow|\right) \frac{e}{2mc} B \left(+\hbar\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}|1,-1\rangle|\uparrow\rangle - \hbar\left(\frac{2}{3}\right)^{1/2}|1,-1\rangle|\uparrow\rangle - \hbar\left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}|1,0\rangle|\downarrow\rangle\right) =$$

$$= \frac{e}{2mc} B(-\hbar)\frac{1}{3} = -\frac{1}{3}\frac{e\hbar}{2mc} B$$

$$\Rightarrow \Delta E(1/2 \to -1/2) = \frac{2}{3}\frac{e\hbar}{2mc} B = \frac{1}{3}\frac{e\hbar}{mc} B$$