Quantenmechanik II
Serie 6

SS 06
Prof. G. Blatter

Aufgabe 6.1 LS-Multipletts

a) Zeige, dass der Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ mit $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ kommutiert.

b) Eine p^2-Konfiguration zerfällt in die Mulitpletts ^1D, ^3P und ^1S. Nach Abbildung 13.9 im Vorlesungsskript werden die Multipletts durch Linearkombinationen von Slaterdeterminanten aufgespannt. Das ^1S Multiplett ist eindimensional und der ^1S Zustand ist proportional zu

$$(|+,-\rangle + |-,+\rangle - |0,0\rangle)\,(|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle)\,.$$

Zeige, dass dieser Zustand tatsächlich ein Eigenzustand von $\mathbf{L^2} = (\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2)^2$ und von $\mathbf{S^2} = (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2)^2$ zu den Eigenwerten $L = S = 0$ ist.

Aufgabe 6.2 Landé-g-Faktor des LSJ-Multipletts

Wir betrachten Atome im schwachen ($< 10^5$ Gauss) Magnetfeld $\vec{H} = (0, 0, H_z)$. Das Magnetfeld erzeugt den Term ($e > 0$)

$$H_\mathrm{H} = \frac{e}{2mc}(\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{H}. \tag{1}$$

a) Zeige in 1. Ordnung Störungstheorie, dass die $(2J+1)$-fache Entartung der Feinstruktur eines LSJ-Multipletts $|KLSJM\rangle$ durch das Magnetgfeld aufgehoben wird. Die Zeeman-Aufspaltung ergibt sich zu

$$\langle KLSJM|H_\mathrm{H}|KLSJM\rangle = g\mu_\mathrm{B} M H_z \tag{2}$$

mit dem Landé-g-Faktor

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}. \tag{3}$$

Tipp: Benutze dazu die Schlussfolgerung (13.73) des Wigner-Eckart Theorems.

b) Vergleiche den g-Faktor (3) mit dem Resultat aus Serie 4, Aufg. 1c),

$$\Delta E_{nljm_J} = g_{lj}\mu_\mathrm{B} m_J H_z, \quad g_{l,l+1/2} = \frac{2+2l}{1+2l}, \quad g_{l,l-1/2} = \frac{2l}{1+2l}, \tag{4}$$

und diskutiere den Zusammenhang.

Aufgabe 6.3 Kernspektrum des zweiatomigen Moleküls

Es hat sich herausgestellt, dass das Potential für die Relativbewegung der Kerne in einem zweiatomigen Molekül ziemlich exakt durch eine einfache analytische Funktion mit drei Parametern beschrieben werden kann.

$$U(R) = U_0\left(e^{-2(R-R_0)/a} - 2e^{-(R-R_0)/a}\right). \tag{5}$$

Gleichung (5) ist das *Morse-Potential.* Es geht exponentiell gegen 0 für grosse R und hat den minimalen Wert $-U_0$ bei $R = R_0$. Falls die "Breite" a etwas kleiner ist als R_0, ist U gross und positiv bei $R = 0$.
Die Schrödinger Gleichung für die Relativbewegung der beiden Kerne ist gegeben durch

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + U(R)\right] w(R,\theta,\phi) = E w(R,\theta,\phi), \tag{6}$$

mit der reduzierten Masse $M = M_1 M_2/(M_1 + M_2)$. Durch den Separationsansatz $w = u\, Y_{KM_K}$ erhält man für $u = \chi/R$ die radiale Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2\chi}{dR^2} + W(R)\chi = E\chi \tag{7}$$

$$W(R) = U(R) + \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2MR^2} \qquad K = 0, 1, 2, \dots\ .$$

Gemäss den Abschätzungen von Born und Oppenheimer ist $\hbar^2/(MR_0^2 U_0) \propto 10^{-4}$ und wir können nach $K(K+1)$ entwickeln. Für kleine Schwingungen kann auch das Potential W um das Minimum R_1 entwickelt werden,

$$W(R) = W_0 + \frac{1}{2}K_0(R-R_1)^2 + b(R-R_1)^3 + c(R-R_1)^4 \tag{8}$$

a) Für $b = c = 0$ ist (7) das Eigenwertproblem eines harmonischen Oszillators. Die beiden letzten Terme von (8) kann man störungstheoretisch behandeln. Dabei liefert der zweitletzte Term einen Beitrag in zweiter Ordunung der vergleichbar ist mit dem Beitrag erster Ordnung des letzten Terms; berechne beide. Man erhält die Eigenwerte

$$E = W_0 + \hbar\sqrt{\frac{K_0}{M}}\left(\nu+\frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2 b^2}{MK_0^2}\left[\frac{15}{4}\left(\nu+\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{7}{16}\right] + \frac{3\hbar^2 c}{2MK_0}\left[\left(\nu+\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{1}{4}\right], \tag{9}$$

wobei $\nu = 0, 1, 2, \dots$ die Quantenzahl des harmonischen Oszillators ist.

b) Zeige, dass das Molekül durch Rotation gestreckt wird. Das heisst, berechne das Minimum R_1 von W in erster Ordnung von $K(K+1)$.

c) Entwickle (9) bis zur zweiten Ordnung in $(\nu + 1/2)$ und $K(K+1)$. Das Resultat lautet

$$\begin{aligned} E &= -U_0 + \frac{\hbar^2 K(K+1)}{2MR_0^2} - \frac{\hbar^4 K^2(K+1)^2 a^2}{M^2 R_0^6 U_0} \\ &+ \hbar\sqrt{\frac{2U_0}{Ma^2}}\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\left[1 - \frac{3\hbar^2 K(K+1)}{4MR_0^2 U_0}\frac{a}{R_0}\left(1-\frac{a}{R_0}\right)\right] - \frac{\hbar^2}{2Ma^2}\left(\nu+\frac{1}{2}\right)^2. \end{aligned} \tag{10}$$

d) Diskutiere die einzelnen Terme in (10) und vergleiche mit der Born-Oppenheimer Approximation.

A.R.