Aufgabe 9.1 Drehimpuls

a) Sei $|lm\rangle$ ein Eigenzustand der Operatoren $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ (Definition gemäss 4.19 im Skript) und sei $\mathbf{n}$ ein normierter Vektor, $\mathbf{n} \in R^3$. Im folgenden wollen wir nur den Unterraum $l = 1/2$ betrachten und schreiben $|+\rangle$ ($|-\rangle$) für den Zustand mit $m = 1/2$ ($m = -1/2$). Berechne

$$(\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}})^2 \,|+\rangle \quad \text{und} \quad (\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}})^2 \,|-\rangle$$

Hinweis: Benütze $\hat{L}_+$, $\hat{L}_-$ und $\hat{L}_z$.

b) Der Operator einer endlichen Drehung ist gegeben durch

$$\hat{U}_{\omega\mathbf{n}} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\omega\,\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}\right),$$

wobei ω = Drehwinkel und $\mathbf{n}$ = Drehachse. Zeige, dass dieser Operator, in der $l = 1/2$ Darstellung, als

$$\hat{U}_{\omega\mathbf{n}} = \cos(\omega/2)\hat{1} - \frac{2i}{\hbar}\sin(\omega/2)(\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}})$$

geschrieben werden kann. Ist $\hat{U}_{0\mathbf{n}} = \hat{U}_{2\pi\mathbf{n}}$?

c) Wähle die Basis

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Finde die Matrizen der Operatoren $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ und $\hat{L}_z$ in dieser Basis.

Aufgabe 9.2 Energieaufspaltung in Kristallfeldern - Symmetriereduktion $O_3 \to O_h$

In dieser Aufgabe wollen wir lernen, wie die Energieniveaus eines Atoms aufspalten, wenn das Atom in einem Kristall plaziert wird.

Zuerst stellen wir fest, dass der Hamiltonian eines Elektrons im Zentralfeld eines Atomkerns invariant ist unter Drehungen und Spiegelungen (Inversion) am Ursprung. Mit anderen Worten, die Symmetriegruppe des Elektrons im Atom ist die Gruppe O_3, die aus der Erweiterung der Drehgruppe SO_3 um die Inversion I hervorgeht: $O_3 = SO_3 \times I$.

An Stelle der irreduziblen $(2l+1)$-dimensionalen Darstellung D_l der Drehgruppe SO_3 treten die Darstellungen $D_l^{\pm}$ der O_3 mit $D_l^{\pm}(I) = \pm\mathbf{1}$ und $D_l^{\pm}(g) = D_l(g)$, $g \in SO_3$. Die Darstellungsmatrizen schreiben sich als:

$$D_l^{\pm}(R(\omega\mathbf{n})) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,\omega\,\mathbf{n} \cdot \mathbf{L}\right)$$

wobei $R(\omega\mathbf{n}) \in SO_3$ die Drehung um den Winkel ω mit Drehachse $\mathbf{n}$ darstellt. Ein wichtiges Merkmal einer Darstellung sind seine Charaktere: $\chi_l^{\pm}(g) = \mathrm{Tr}[D_l^{\pm}(g)],\ g \in O_3$. Die Charaktertafel für O_3 ist in Tafel 1 dargestellt.

Betrachte nun die kubische Gruppe mit Inversion O_h. Diese Gruppe ist eine Untergruppe von O_3 und besitzt 48 Elemente in 10 Klassen, siehe dazu Tafel 2. Die irreduziblen Darstellungen D_α und ihre Charaktere $\chi_\alpha(g) = \mathrm{Tr}[D_\alpha(g)],\ g \in O_h$ sind in Tafel 3 dargestellt.

Durch die Einschränkung der O_3 auf die Elemente der O_h, zerfallen die Darstellungen $D_l^{\pm}$ in die irreduziblen Darstellungen D_α:

$$D_l^{\pm} = \bigoplus_\alpha n_\alpha D_\alpha \ , \quad n_\alpha = \frac{1}{48} \sum_{g \in O_h} \chi_\alpha(g) \chi_l^{\pm}(g).$$

Die Charaktere $\chi_l^{\pm}(g)$ für $g \in O_h$ sind in Tafel 4 gegeben.

Wie bereits bemerkt, ist der Hamiltonian eines freien Atoms H_{O_3} symmetrisch unter O_3:

$$[H_{O_3}, D_{O_3}(g)] = 0.$$

$D_{O_3}(g)$ ist die O_3-Darstellung des gesamten Hilbertraums, die sich schreiben lässt als:

$$D_{O_3}(g) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} \left(D_{2l}^{+}(g) \oplus D_{2l+1}^{-}(g) \right)$$

Wir betrachten hier Teilchen ohne Spin, d.h. es treten nur ganzzahlige l auf. Jede mögliche Energie $E_l^{\pm}$ eines freien Atoms gehört dann zu einer Darstellung von O_3: $D_0^+,\ D_1^-,\ D_2^+,\ D_3^-, ...,$ ist also $(2l+1)$-fach entartet.

Wird das Atom nun in einem Kristall plaziert, werden die Elektronen vom Kristallfeld beeinflusst, d.h. von dem elektrischen Feld welches am Ort des Atoms von all den anderen Atomen im Kristall erzeugt wird. Dieses elektrische Feld hat die Symmetrie des Kristalls, die hier als O_h gewählt wird. Zu H_{O_3} wird also eine Störung V_{O_h} addiert, die nicht invariant ist unter O_3 aber O_h-Symmetrie aufweist. Der resultierende Hamiltonian $H_{O_h} = H_{O_3} + V_{O_h}$ ist dann auch nur noch symmetrisch unter O_h.

a) Zeige, dass die Charaktere der Darstellung $D_l^{\pm}$ der Gruppe O_3 gegeben sind durch

$$\chi_l^{\pm}(I \cdot R(\omega \mathbf{n})) = \pm \frac{\sin\left((l+1/2)\omega\right)}{\sin\left(\omega/2\right)}.$$

Beachte dabei, dass die Änderung der Drehachse $\mathbf{n}$ einer Basistransformation entspricht, unter der die Charaktere immer invariant sind. Es kann also eine günstige Drehachse zur Berechnung gewählt werden.

b) Finde die Dimension d_α der irreduziblen Darstellung D_α aus der Beziehung

$$G = \sum_{\alpha=1}^{k} d_\alpha^2$$

wobei G die Ordnung der Gruppe O_h ist und k die Anzahl der Klassen.

c) Überzeuge Dich von der Richtigkeit der Tafel 4, indem Du a) verwendest. Die entsprechenden Drehwinkel der Kristallgruppe, sind unter der Tafel 2 notiert.

d) Gib für $l = 0, 1, 2, 3$ an, wie die Darstellungen $D_l^{\pm}$ in Darstellungen D_α zerfallen. Verwende hierfür Tafel 3 und 4. Nimmt man nun eine Energiemessung am Atom vor, so wird man sehen, dass sich die Multiplett-Struktur des freien Atoms aufgespalten hat. Dies geschieht entsprechend der Anzahl der in $D_l^{\pm}$ enthaltenen Darstellungen der Kristallgruppe.

D. N.

Frohe Weihnachten und ein gutes neues Jahr!