

Arbeitsblatt 14

04.02.2019

Stationäre Störungstheorie

Auf diesem Übungsblatt werden Sie mehrere Anwendungsbeispiele des in der Quantenmechanik sehr nützlichen Werkzeugs der Störungstheorie kennenlernen, wobei wir uns zunächst auf zeitunabhängige Störungen beschränken. Die erste Aufgabe behandelt Störungen des harmonischen Oszillators in Form anharmonischer Potentialterme und relativistischer Korrekturen. In der zweiten Aufgabe verwenden Sie die Störungstheorie zur Herleitung der Feinstruktur des Wasserstoffatoms. Die dritte Aufgabe beschäftigt sich schließlich mit Übergangswahrscheinlichkeiten in Drei-Niveau-Systemen.

Aufgabe 1: Stationäre Störungstheorie für einen harmonischen Oszillator

Wir wollen zunächst betrachten, wie sich das Spektrum eines anharmonischen Oszillators im Verhältnis zu einem harmonischen Oszillator ändert. Der anharmonische Oszillator werde durch den Hamilton-Operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} + \alpha \hat{x}^3 + \beta \hat{x}^4 \quad (1)$$

beschrieben, wobei $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$.

- (a) Zeigen Sie mit Hilfe der zeitunabhängigen Störungstheorie, dass die Eigenwerte von (1) näherungsweise in erster Ordnung durch

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \beta \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 (6n^2 + 6n + 3) \quad (2)$$

gegeben sind.

Hinweis: Werten Sie Erwartungswerte von Potenzen von \hat{x} aus, indem sie \hat{x} durch Erzeuger- und Vernichter-Operatoren darstellen. Verwenden Sie Symmetrie-Argumente um sich die Berechnung für ungerader Potenzen von \hat{x} zu ersparen.

- (b) Berechnen Sie damit die Zustandskorrekturen in erster Ordnung.

Nun soll untersucht werden, wie sich das Spektrum im Fall relativistischer Teilchen verhält. In diesem Fall müssen wir von der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung $T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ für die kinetische Energie ausgehen. Diese entwickeln wir zweiter in Ordnung in p^2 es gilt dann:

$$T = mc^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}} \approx mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2}. \quad (3)$$

Der erste Term ist nur eine additive Konstante die als Ruheenergie bezeichnet wird. Man kann diese im Hamilton-Operator weglassen, dafür muss diese anschließend von allen Energieeigenwerten abgezogen werden. Der störungstheoretisch zu behandelnde Hamilton-Operator lautet also

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}. \quad (4)$$

- (c) Bestimmen Sie analog zu den vorhergehenden Teilaufgaben die relativistischen Energie- und Zustandskorrekturen in erster Ordnung der Störungstheorie.

Aufgabe 2: Die Feinstruktur des Wasserstoffatoms

(10 Punkte)

Mithilfe der Ergebnisse von Aufgabe 1 des letzten Blattes betrachten wir in dieser Aufgabe welche Auswirkungen sowohl relativistische Effekte als auch Spin-Orbitkopplung auf die Energie von Wasserstoffatomen bzw. wasserstoffartiger Ionen hat.

Die Ergebnisse der vorangegangenen Aufgabe sind zusammengefasst, mit $E_n^0 = -mc^2(Z\alpha)^2/(2n^2)$, $n = n_r + \ell + 1$; $n_r, \ell = 0, 1, 2, \dots$, sowie dem Bohrradius $a_0 = \hbar^2/(me^2)$ und der Feinstrukturkonstante $\alpha = e^2/(\hbar c)$,

$$\left\langle \frac{Ze^2}{r} \right\rangle = -2E_n^0, \quad \left\langle \frac{Z^2e^4}{r^2} \right\rangle = 4(E_n^0)^2 \frac{n}{\ell + 1/2}, \quad \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3a_0^{-3}}{n^3\ell(\ell + 1/2)(\ell + 1)}. \quad (5)$$

Relativistische Korrekturen

Die Schrödingergleichung nutzt die nichtrelativistische Energie-Impulsbeziehung $E_{\text{kin}}^{\text{nr}} = p^2/(2m)$. Für eine relativistische Betrachtung ist die Nutzung der relativistischen Energie-Impulsbeziehung $E_{\text{kin}}^{\text{rel}} = \sqrt{p^2c^2 + (m^2c^4)}$ vonnöten. Um eine Störungstheorie erster Ordnung anwenden zu können, müssen wir annehmen, dass das System sich nur geringfügig vom Ungestörten (Nichtrelativistischen) unterscheidet. Aufgrund dessen genügt es $E_{\text{kin}}^{\text{rel}}$ in $p^2/(mc)^2$ um eine weitere Ordnung als den nichtrelativistischen Fall zu entwickeln.

- (a) Entwickeln Sie $E_{\text{kin}}^{\text{rel}}$ um $p^2c^2/(m^2c^4) \ll 1$ um eine weitere Ordnung als im nichtrelativistischen Fall. Bestimmen Sie damit den Hamiltonian in der Form $H = H_0 + \lambda H_1$, mit $\lambda = -1/(8m^3c^2)$ und schreiben Sie H_1 als Funktion von H_0 um.

Leiten Sie die allgemeine Form der nicht-entarteten stationären Störungstheorie bis zur ersten Ordnung her.

Hinweis: Ein konstanter Offset des Hamiltonians führt zu einer konstanten Verschiebung aller Eigenenergien, jedoch zu keiner Änderung der Struktur des Hamiltonians/Eigenzustände. Daher kann ein solcher ignoriert werden.

- (b) Das radialsymmetrische Zentralkraftpotential führt zu entarteten Eigenwerten weswegen man erwarten würde dass eine entartete Störungsrechnung nötig wäre. Dies ist jedoch nicht nötig für die Korrekturen erster Ordnung. Begründen Sie diese Vereinfachung.

Hinweis: Eine mögliche Herangehensweise: Was gilt für $[H, L_z]$, $[H, \vec{L}^2]$? Was bedeutet das für die Skalarprodukte der Eigenvektoren $|n, l, m\rangle$ der entarteten Eigenräume?

- (c) Bestimmen Sie störungstechnisch welchen Effekt die relativistische Korrektur in erster Ordnung auf die Energie des Wasserstoffatoms bzw. die wasserstoffartigen Ionen hat. Ändert sich die Entartung der Eigenzustände (betrachten Sie die Gesamtenergie)? Stärken diese Korrekturen die Bindung des Elektrons an den Kern oder schwächen sie sie eher ab?

Hinweis: Schreiben Sie H_1 als Funktion des ungestörten Hamiltonians. Nutzen Sie dann die Resultate von Aufgabe 1 des letzten Blattes um die Korrektur zu bestimmen.

Spin-Orbit-Kopplung

Im Bezugssystem des Elektrons bewegt sich der Kern um das Elektron. Diese bewegte Ladung führt zu einem induzierten magnetischen Feld \vec{B} . Da das Elektron ein magnetisches Moment aufgrund des Spins besitzt, wechselwirkt es mit diesem. Der Spin-Orbit-Hamiltonian ist (in cgs Einheiten) von der Form

$$H_{SO} = -\vec{\mu}_e \vec{B} = \frac{g_e e}{4mc} \vec{S} \cdot \left(\frac{Ze}{mc r^3} \vec{L} \right), \quad (6)$$

wobei $g_e \approx 2$ das gyromagnetische Moment, μ_e das magnetische Moment des Elektrons. Da die Schrödingergleichung selbst keinen Spin enthält ist es nötig, um den Effekt von Spin betrachten zu können, den Hilbertraum $H = H_H \oplus H_s$, mit H_H der Wasserstoffelektron-Hilbertraum und H_s der Spin-1/2-Hilbertraum, 'händisch' zu erweitern $|n, \ell, m_\ell\rangle \rightarrow |n, j, m_j, \ell, s\rangle$. Nach Konstruktion kommutiert der Spinoperator mit allen Operatoren des Systemhilbertraumes und die Quantenzahl $s = 1/2$ steht für die Quantenzahl des Spins. Der Drehimpuls und Spin können (vektoriell) aufsummiert werden zum Gesamtdrehimpuls gegeben durch die Quantenzahl $j = |\ell - s|, |\ell - s| + 1, \dots, |\ell + s|$.

- (d) Der Gesamtdrehimpulsoperator ist gegeben durch $\vec{J} = \vec{S} + \vec{L}$. Schreiben Sie H_{SO} in Abhängigkeit von $\vec{J}^2, \vec{L}^2, \vec{S}^2$ um. Berechnen Sie mithilfe der Ergebnisse des letzten Blattes die Korrektur erster Ordnung für die Energie in Abhängigkeit. Tritt ein Aufspalten der entarteten Eigenzustände auf, bei gegebenen Zahlen n, ℓ ?

Hinweis: Die entartete Störungstheorie ist ebenfalls anwendbar, da die Zustände ebenfalls eine ONB bilden trotz entarteter Eigenwerte. Welche Werte kann j annehmen?

Vergleich mit Wasserstoffspektrum

- (e) Zeichnen Sie qualitativ das Energiespektrum mit den obigen Ergebnissen und vergleichen Sie es mit dem des Wasserstoffatoms in Bild 1

Der Effekt der Spin-Orbitkopplung und der relativistischen Korrekturen ist ein Verschieben der Energieniveaus und Aufsplitten (Feinstruktur). Diese Terme wurden, historisch betrachtet, händisch in die Schrödingergleichung eingesetzt um die experimentellen Befunde zu erklären (siehe Bild 1). Die Schrödingergleichung selbst enthält von sich aus weder Spin- noch relativistische Terme. Für eine genauere Behandlung dieser Terme ist es nötig auf die Diracgleichung zu wechseln, welche unter Betrachtung der relativistischen Energie-Impulsbeziehung für Spin 1/2 hergeleitet wurde.

Ergebnisse der Störungsrechnungen:

$$E_n = E_n^0 + E_n^{rel} + E_n^{SO} = E_n^0 - \frac{mc^2 Z^4 \alpha^4}{2} \left(-\frac{3}{4n^4} + \frac{1}{n^3(\ell + 1/2)} \right) + \frac{mc^2 Z^4 \alpha^4}{4} \frac{1}{n^3 \ell (\ell + 1/2) (\ell + 1)} \begin{cases} \ell & \text{falls } j = \ell + 1/2 \\ -(\ell + 1) & \text{falls } j = \ell - 1/2 \end{cases}$$

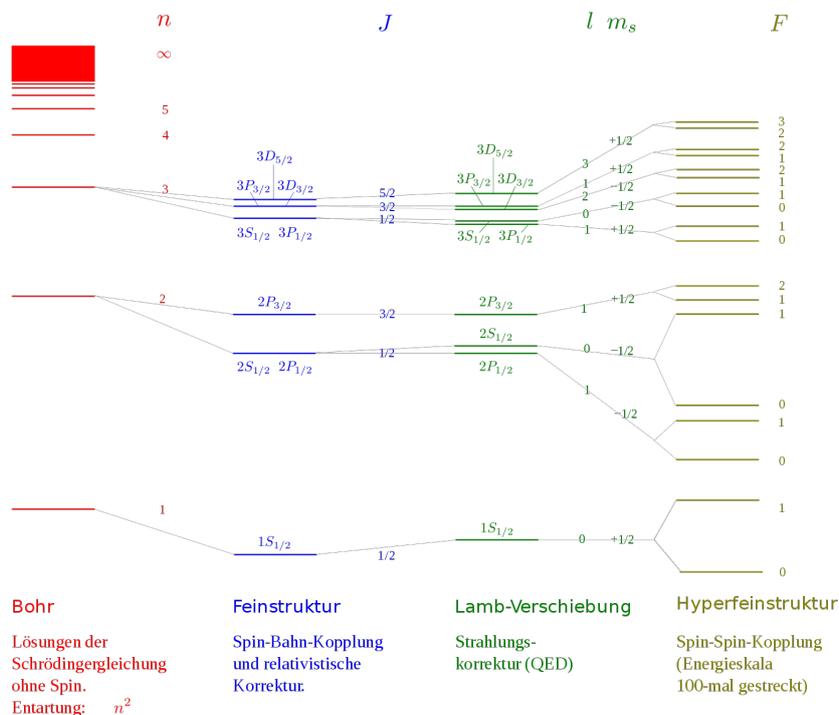


Abbildung 1: Feinstruktur und Hyperfeinstruktur des Wasserstoffatoms.

Aufgabe 3: Drei-Niveau-System und Zwei-Photonen Übergang (10 Punkte)

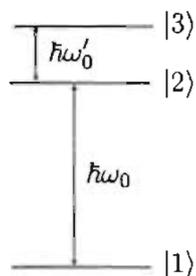


Abbildung 2: Aufgabe 3: 3-Niveau-System

In dieser Aufgabe betrachten wir ein Atom mit drei Energieniveaus. Die Abstände zwischen dem ersten und zweiten Niveau sowie zweiten und drittem Niveau müssen hierbei unterschiedlich sein $\omega_0 \neq \omega'_0$ (siehe Abb. 2). Das System wird nun einem veränderlichen externen elektrischen Feld ausgesetzt, welches Übergänge zwischen den verschiedenen Niveaus anregt. Es ist explizit gegeben durch $V(t) = v(t) + v^\dagger(t)$

$$v(t) = \hbar e^{i\omega t} (\Omega |1\rangle \langle 2| + \Omega' |2\rangle \langle 3|). \quad (7)$$

(a) Zeigen Sie, dass die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{12}(t)$ also vom Zustand $|1\rangle$ zum Zustand $|2\rangle$ zu wechseln in erster Ordnung einer Störungsrechnung gegeben ist durch

$$P_{12}^{(1)}(t) \approx \Omega^2 \frac{4}{(\omega - \omega_0)^2} \sin^2 \left(\frac{(\omega - \omega_0)t}{2} \right) \quad (8)$$

Zeigen Sie außerdem, dass $P_{12}^{(1)}(t)$ für lange Zeiten $t \gg |\omega_0 - \omega'_0|^{-1}$ und beliebige ω im Vergleich zum Resonanzfall $\omega \approx \omega_0$ sehr klein wird.

- (b) Begründen Sie warum es keinen Übergang $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$ geben kann und er also in erster Ordnung verschwindet. Um daher eine Aussage über diesen Übergang zu treffen müssen Sie höhere Ordnungen der Störung berücksichtigen. Bestimmen Sie deshalb die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{13}^{(2)}(t)$ in zweiter Ordnung. Gehen Sie hierbei wieder von großen Zeiten aus und ignorieren Sie deshalb auftretende Kreuzterme. Zeigen Sie, dass die Übergangswahrscheinlichkeit unter diesen Annahmen gegeben ist durch

$$P_{13}^{(2)}(t) \approx \left(\frac{\Omega\Omega'}{\omega_0 - \omega} \right)^2 [f((\omega_0 + \omega'_0 - 2\omega, t))^2 + (f(\omega'_0 - \omega, t))^2], \quad (9)$$

wobei $f(\omega) = \frac{2}{\omega} \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right)$. Skizzieren Sie anschließend die auftretenden Resonanzen für den Fall $\omega'_0 = \frac{1}{2}\omega_0$.

- (c) Das System befinde sich anfangs im Grundzustand $|1\rangle$. Skizzieren Sie das Absorptionsspektrum (Also die Übergänge $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$ und $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$) für verschiedene Werte der Frequenz ω des externen Feldes.