
12. ÜBUNG ZUR QUANTENMECHANIK

Besprechung der Präsenzaufgaben: **Fr., 3.7.2015**
Abgabe der schriftlichen Aufgaben: **Di., 7.7.2015**

P 48 Zeeman-Effekt für Teilchen ohne Spin (5 Punkte)

Wir wollen das Wasserstoff-Atom in einem konstanten Magnetfeld \vec{B} betrachten. Der Hamiltonoperator hat die Form

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze_0^2}{r} - \frac{e_0}{2mc}\vec{B} \cdot \vec{\mathbf{L}} + \frac{e_0^2}{8mc^2}|\vec{x} \times \vec{B}|^2. \quad (1)$$

Der dritte Term trägt zum Paramagnetismus des Atoms bei, der letzte ergibt den Diamagnetismus. Wir wollen das Magnetfeld in z -Richtung wählen, $\vec{B} = (0, 0, B)$. Für schwache Magnetfelder kann der quadratische (diamagnetische) Term oft vernachlässigt werden.

- (a) Schätzen Sie das Verhältnis des quadratischen und des linearen Terms in B ab.

Hinweis: Nehmen Sie an, dass $|\vec{x}|$ etwa dem Bohrschen Radius a entspricht und setzen Sie $\langle \mathbf{L}_3 \rangle \simeq \hbar$.

- (b) Wir wollen den Fall schwacher Magnetfelder untersuchen, vernachlässigen also den quadratischen Term in B , und den normalen Zeeman-Effekt, d. h. ohne Spin. Zeigen Sie, dass die bekannten Eigenzustände ψ_{nlm} des Coulomb-Problems auch Eigenzustände zu \mathbf{H} sind und geben Sie das Energiespektrum an.

Bemerkung: Der Zeeman-Effekt ist ein Beispiel für Störungstheorie mit Entartung. Durch die Störung wird die Entartung der Zustände mit verschiedener magnetischer Quantenzahl m vollständig aufgehoben. Die Entartung stellt beim Zeeman-Effekt kein zusätzliches Problem dar, da die Störung bezüglich der Eigenzustände ψ_{nlm} des ungestörten Coulomb-Potentials bereits diagonal ist.

S 49 Variationsverfahren und Wasserstoffatom (3 + 3 Punkte)

Wir wollen das Ritzsche Variationsverfahren am Beispiel des Wasserstoffatoms testen. Sei dazu \mathbf{H} der Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms, d. h. der Hamiltonoperator für die Bewegung eines Elektrons der Ladung $-e_0$ und der Masse m im Coulomb-Potential einer Kernladung Ze_0 . Als Testfunktion wählen wir die (normierte) Grundzustandswellenfunktion eines dreidimensionalen harmonischen Oszillators mit dem Potential $\frac{1}{2}m\omega^2r^2$,

$$\psi_0(\vec{x}) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right). \quad (2)$$

- (a) Finden Sie damit eine optimale Abschätzung für den Grundzustand des Wasserstoffatoms, indem Sie ω variieren. Vergleichen Sie das Resultat mit der exakten Grundzustandsenergie.

Hinweis: Es gilt
$$\langle \psi_0 | \mathbf{H} \psi_0 \rangle = \frac{3}{4}\hbar\omega - \frac{2Ze_0^2}{\hbar} \left(\frac{m\hbar\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3)$$

- (b) (optional) (+ 3 Punkte)
Beweisen Sie Gl. (3) aus Teil (a).

S 50 Landau-Niveaus

(5 Punkte)

Wir wollen die Bewegung eines Elektrons in einem konstanten Magnetfeld untersuchen, wobei wir den Spin des Elektrons vernachlässigen. Das Magnetfeld sei entlang der z -Richtung orientiert, $\vec{B} = (0, 0, B)$. Zeigen Sie, dass das Vektorpotential gewählt werden kann als $\vec{A} = (0, Bx, 0)$, d. h. dass $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$.

- (a) Aus der Vorlesung wissen Sie, dass für ein konstantes Magnetfeld \vec{B} auch die Wahl $\vec{A}' = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{x}$ möglich ist. Zeigen Sie, dass sich dieses und das oben genannte Potential nur um ein Gradientenfeld (bzw. eine Eichtransformation) unterscheiden.
- (b) Zeigen Sie, dass der Hamiltonoperator

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \left(\vec{\mathbf{P}} + \frac{e_0}{c} \vec{A} \right)^2 \quad (4)$$

sowohl mit der y - als auch mit der z -Komponente des Impulsoperators kommutiert. Die Eigenzustände von \mathbf{H} können daher mit dem Separationsansatz $\psi(x, y, z) = \nu(x)f(y)g(z)$ gefunden werden. Geben Sie die Funktionen f und g an. Wir wollen $g(z)$ so wählen, dass der Eigenwert zu \mathbf{P}_3 gerade 0 ist.

- (c) Leiten Sie eine Eigenwertgleichung für $\nu(x)$ her und führen Sie diese auf die Eigenwertgleichung für die Energie eines harmonischen Oszillators zurück.
- (d) Lesen Sie das Energiespektrum ab. Die aus der Gleichung für ν resultierenden Energieniveaus heißen Landau-Niveaus.

S 51 Linearer Stark-Effekt

(7 Punkte)

Wir wollen die Aufspaltung des angeregten Niveaus des Wasserstoffatoms mit der Hauptquantenzahl $n = 2$ in einem konstanten elektrischen Feld untersuchen. Dabei soll der Spin des Elektrons vernachlässigt werden.

Das elektrische Feld sei in z -Richtung angeordnet, $\vec{E} = (0, 0, E)$. Das zugehörige elektrische Potential ist $\phi(\vec{x}) = -x_3 E$ (warum?), und der Wechselwirkungsterm im Hamiltonoperator ist also

$$\mathbf{W} = e \phi(\vec{x}) = -e x_3 E, \quad (5)$$

wobei $e = -e_0 < 0$ die Ladung des Elektrons ist.

Der Einfluss des Feldes soll in Störungstheorie 1. Ordnung behandelt werden. Zur Hauptquantenzahl $n = 2$ gibt es den 2s-Zustand ($l = 0$) und die drei 2p-Zustände ($l = 1$) gleicher Energie. Es liegt also 4-fache Entartung vor. Bestimmen Sie die Matrixelemente der Störung in diesem Entartungsraum. Diagonalisieren Sie diese Matrix, um die Aufspaltung der Niveaus zu erhalten, und geben Sie die zugehörigen Eigenzustände an.

Hinweis: Zeigen Sie zunächst $[\mathbf{L}_3, \mathbf{W}] = 0$ und bilden Sie die Matrixelemente dieser Gleichung. Folgern Sie, dass nur solche Matrixelemente von \mathbf{W} , $\langle \psi_{nlm} | \mathbf{W} \psi_{n'l'm'} \rangle$, von Null verschieden sein können, in denen beide Zustände dieselbe magnetische Quantenzahl m haben. Schreiben Sie dann die Störung in Kugelkoordinaten und benutzen Sie die bekannten Wellenfunktionen ψ_{2lm} , um auch diese Matrixelemente der Störung explizit zu berechnen.

S 52 Kopplung von Spin und Bahndrehimpuls

(optional, + 8 Punkte)

Der Hilbertraum für die Kopplung von Bahndrehimpuls und Spin wird aufgespannt durch die Produkte $\chi_{\pm} Y_{lm}$ von Spinoren χ_{\pm} und Kugelflächenfunktionen Y_{lm} . Für die Spinoren gilt

$$\vec{S}^2 \chi_{\pm} = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_{\pm} \quad \mathbf{S}_3 \chi_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} \chi_{\pm}. \quad (6)$$

Der Gesamtdrehimpuls ist $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.

- Zeigen Sie, dass die Produkte $\chi_{\pm} Y_{lm}$ Eigenzustände zu \mathbf{J}_3 sind und geben Sie die Eigenwerte an.
- Geben Sie den Eigenzustand $|\varphi_1\rangle$ zu \mathbf{J}_3 mit dem maximal möglichen Eigenwert an. Zeigen Sie, dass dieser Zustand ein Eigenzustand zu \vec{J}^2 ist und bestimmen Sie den Eigenwert.
Hinweis: Verwenden Sie $\vec{J}^2 = \mathbf{J}_- \mathbf{J}_+ + \mathbf{J}_3^2 + \hbar \mathbf{J}_3$.
- Gewinnen Sie durch Anwendung eines geeigneten Operators aus $|\varphi_1\rangle$ einen Zustand mit demselben Eigenwert bezüglich \vec{J}^2 und einem um \hbar kleineren Eigenwert zu \mathbf{J}_3 .
- Finden Sie den dazu orthogonalen Zustand mit demselben Eigenwert zu \mathbf{J}_3 . Ist dieser Zustand ein Eigenzustand zu \vec{J}^2 ?
- Wenden Sie $\vec{L} \cdot \vec{S}$ auf die in (b) bis (d) gefundenen Zustände an.

Hinweis: $\mathbf{L}_{\pm} Y_{lm} = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} \hbar Y_{l, m \pm 1}$

S 53 Alkali-Atome

(5 Punkte)

In einem Alkali-Atom wird die Kernladung durch die Elektronen gefüllter Schalen abgeschirmt, so dass das effektive Potential für das Leuchtelektron die Form

$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{e_0^2}{r} (1 + (Z - 1)\chi(r)) \quad (7)$$

hat, wobei χ eine monoton fallende Funktion ist mit $\chi(r) \geq 0$, $\chi(0) = 1$ und $\chi(\infty) = 0$. Ein möglicher Ansatz für diese Abschirmfunktion ist z. B. $\chi(r) = \exp(-r/a_0)$. Im Folgenden wollen wir den Spin des Elektrons vernachlässigen.

- Geben Sie die Ausdrücke für die Energie des Leuchtelektrons mit der Hauptquantenzahl $n > 1$ in Störungstheorie 1. Ordnung an, indem Sie die Abweichung vom Coulomb-Potential als Störung betrachten. (Hier ist keine Rechnung erforderlich.)
Hinweis: Beachten Sie die auftretende Entartung.
- Zeigen Sie, dass die Störung (d. h. die Energieverschiebung) diagonal in den Quantenzahlen l und m ist.
- Argumentieren Sie, dass der Zustand mit $l = 0$ am tiefsten und dass der Zustand mit $l = n - 1$ am höchsten liegt. Betrachten Sie hierzu die Störung in erster Ordnung.
- Bestimmen Sie das Verhalten der exakten Lösung am Ursprung.

Weitere Informationen unter:

<http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~ewerz/qm15.html>