

Übung Nr. 2

4. Linearer Stark-Effekt

Wir wollen die Aufspaltung des angeregten Niveaus des Wasserstoffatoms mit der Hauptquantenzahl $n = 2$ in einem konstanten elektrostatischen Feld untersuchen. Der Einfachheit halber wird der Spin des Elektrons vernachlässigt. Es seien dann $|\psi_{n\ell m}\rangle$ bzw. E_n die Eigenzustände bzw. Eigenenergien des Wasserstoffatoms bei verschwindendem elektrischem Feld.

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

$$W = -e\phi(\vec{x}) = ez\mathcal{E},$$

wobei $-e$ die Ladung des Elektrons ist.

i. Zeigen Sie zunächst $[L_z, W] = 0$, wobei L_z die z -Komponente des Bahndrehimpulsoperators \vec{L} ist, und bilden Sie die Matrixelemente dieser Gleichung. Folgern Sie, dass nur solche Matrixelemente von W , $\langle \psi_{n\ell m} | W | \psi_{n'\ell'm'} \rangle$, von Null verschieden sein können, in denen beide Zustände dieselbe magnetische Quantenzahl m haben.

ii. Der Einfluß des elektrischen Felds soll in Störungstheorie 1. Ordnung behandelt werden. Zur Hauptquantenzahl $n = 2$ gibt es den 2s-Zustand ($\ell = 0$) und die drei 2p-Zustände ($\ell = 1$) gleicher Energie. Es liegt also 4-fache Entartung vor.

Schreiben Sie die Störung in Kugelkoordinaten und benutzen Sie die bekannten Wellenfunktionen $\psi_{2\ell m}$, um die Matrixelemente der Störung im Entartungsraum explizit zu berechnen. Diagonalisieren Sie diese Matrix, um die Aufspaltung der Niveaus zu erhalten und geben Sie die zugehörigen Eigenzustände an.

5. Ritzsches Variationsverfahren: Wasserstoffatom

Wir wollen die (bekannte!) Energie des Grundzustands des Wasserstoffatoms mithilfe des Variationsverfahrens abschätzen. Es sei H der zugehörige Hamiltonoperator, d.h. der Hamiltonoperator für die Bewegung eines Elektrons der Ladung $-e$ und der Masse m_e im Coulombpotential einer Kernladung $+e$. Als Testfunktion wählen wir die (normierte) Grundzustandswellenfunktion eines dreidimensionalen harmonischen Oszillators mit dem Potential $\frac{1}{2}m_e\omega^2 r^2$,

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

mit $r = |\vec{x}|$.

i. Zeigen Sie, dass $\langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle = \frac{3}{4}\hbar\omega - \frac{2e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m_e\hbar\omega}{\pi}}$.

ii. Finden Sie eine optimale Abschätzung für den Grundzustand des Wasserstoffatoms, indem Sie ω variieren. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der exakten Grundzustandsenergie.

6. Ritzsches Variationsverfahren: Helium-Atom

Unter der Annahme eines unendlich massiven Atomkerns lautet der Hamiltonoperator des Helium-Atoms

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_e} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}, \quad (1)$$

wobei die Indizes sich auf die beiden Elektronen beziehen und $r_i = |\vec{x}_i|$. Der Hilbertraum dieses Problems wird im Ortsraum durch Zweiteilchen-Wellenfunktionen $\phi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ aufgespannt. Aufgrund der Wechselwirkung der Elektronen kann dieses Problem nicht exakt gelöst werden. Wir wollen deshalb das Ritzsche Variationsverfahren anwenden, um die Grundzustandsenergie abzuschätzen.

Als Testfunktion wollen wir das Produkt zweier Einteilchen-Wellenfunktionen ansetzen, die jeweils Eigenzustände des Coulomb-Problems beschreiben. Es erscheint physikalisch sinnvoll anzunehmen, dass das elektrische Feld des Kerns durch das jeweils andere Elektron „abgeschirmt“ wird. Wir wollen dies in der Wahl der Testfunktion berücksichtigen, indem wir in den beiden Einteilchenfunktionen die Kernladung als freien Parameter wählen, den wir dann variieren. Wir setzen also an

$$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \psi_{100}^{Z_{\text{eff}}}(\vec{x}_1) \psi_{100}^{Z_{\text{eff}}}(\vec{x}_2),$$

worin

$$\psi_{100}^Z(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-Zr/a_0}$$

die normierte Grundzustandswellenfunktion für das Coulomb-Problem mit der Kernladung Ze ist, wobei a_0 den Bohrschen Radius des Wasserstoffatoms bezeichnet.

Finden Sie eine optimale Abschätzung für die Grundzustandsenergie des Helium-Atoms, indem Sie die effektive Kernladungszahl Z_{eff} variieren.

Hinweis: $\int d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 |\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)|^2 \frac{e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} = \frac{5}{8} \frac{Z_{\text{eff}} e^2}{a_0}$ (vgl. Vorlesung!).