Aufgabe 1: [**P.**]

Betrachten Sie die Bewegung eines Teilchens im konstanten Magnetfeld

$$\mathbf{B} = [0, 0, b]$$

a)[**1P.**] Zeigen Sie, dass ein zugehöriges Vektorpotential die Form

$$\mathbf{A} = [0, bx, 0]$$

besitzt. Verifizieren Sie, dass das Vektorpotential der Coulomb-Eichung genügt.

Lösung:

$$\nabla \times \mathbf{A} = [\partial_y A_z - \partial_z A_y, \partial_z A_x - \partial_x A_z, \partial_x A_y - \partial_y A_x] = [0, 0, b] = \mathbf{B}.$$

Die Coulumb-Eichung:

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \partial_x A_x + \partial_y A_y + \partial_z A_z = 0 \qquad \blacksquare$$

b)[**3P.**] Wie lautet die Hamiltonfunktion eines Teilchens der Ladung q, das sich in diesem Potential bewegt? Formulieren Sie die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen und geben Sie die allgemeine Lösung an.

Lösung:
Die Hamiltonfunktion für ein Teilchen mit Ladung q in einem statischen Magnetfeld lautet

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 \\ &= \frac{1}{2m} \left(p^2 - 2q\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + q^2 A^2 \right) \\ &= \frac{1}{2m} \left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 - 2qbp_y x + q^2 b^2 x^2 \right). \end{aligned}$$

Die Komponenten der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen werden über $\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$ und $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i}$ berechnet

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{p_x}{m} & \dot{p}_x &= \frac{1}{m}(qbp_y - q^2 b^2 x) \\ \dot{y} &= \frac{1}{m}(p_y - qbx) & \dot{p}_y &= 0 \\ \dot{z} &= \frac{p_z}{m} & \dot{p}_z &= 0 \end{aligned}$$

Nochmaliges Differenzieren der $\dot{x}_i$-Gleichungen führt auf

$$\begin{aligned} \ddot{x} &= \frac{\dot{p}_x}{m} \\ \ddot{y} &= \frac{1}{m}(\dot{p}_y - qb\dot{x}) \\ \ddot{z} &= \frac{\dot{p}_z}{m} \end{aligned}$$

Hier können nun die Gleichungen für die $\dot{p}_i$ eingesetzt werden

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= \frac{1}{m^2}(qbp_y - q^2b^2x)\\ \ddot{y} &= -\frac{qb}{m}\dot{x}\\ \ddot{z} &= 0\end{aligned}$$

Aus der Gleicung für $\dot{y}$ erhalten wir $p_y = m\dot{y} + qbx$ und setzen dies in die Gleichung für $\ddot{x}$ ein und erhalten mit $\omega_c = qb/m$

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= \frac{qb}{m}\dot{y} = \omega_c\dot{y}\\ \ddot{y} &= -\frac{qb}{m}\dot{x} = -\omega_c\dot{x}\\ \ddot{z} &= 0\end{aligned}$$

Diese drei DGL's beschreiben die Bewegung eines Teilchens mit der Ladung q in einem stationären homogenen Magnetfeld mit nur einer Komponente. Die Frequenz ω_c heisst SZyklotronfrequenz". Mit der Ersetzung $\dot{x}_i = v_i$ erhalten wir

$$\begin{aligned}\dot{v}_x &= \omega_c v_y\\ \dot{v}_y &= -\omega_c v_x\\ \dot{v}_z &= 0\end{aligned}$$

Die letzte Gleichung beschreibt die Bewegung des Teilchens in z-Richtung. Die Allgemeine Lösung lautet

$$v_z = v_0$$

wobei v_0 die Anfangsgeschwindigkeit des Teilchens in z-Richtung ist. Nochmaliges Differenzieren der beiden ersten Gleichungen führt auf

$$\begin{aligned}\ddot{v}_x &= \omega\dot{v}_y = -\omega_c^2 v_x\\ \ddot{v}_y &= -\omega\dot{v}_x = -\omega_c^2 v_y\end{aligned}$$

Diese Struktur der beiden Gleichungen ist analog zu der des harmonischen Oszillators. Die allgemeine Lösung lautet

$$v_i = A_i \cos\omega_c t + B_i \sin\omega_c t$$

Das Teilchen vollführt in der x-y-Ebene eine Kreisbewegung während es sich in der z-Richtung gleichförmig bewegt. ■

c)**[1P.]** Bestimmen Sie den Hamiltonoperator durch Anwendung der Jordan'schen Regel.

Lösung:

$$\begin{aligned}H &= \frac{1}{2m}\big(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}\big)^2\\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle - \frac{q}{m}bxp_y + \frac{q^2}{2m}b^2x^2 \quad \blacksquare\end{aligned}$$

d)**[2P.]** Zur Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung kann ein Separationsansatz verwendet werden:

$$\Psi(x, y, z) = \varphi_{||}(z)\varphi_{\perp}(x, y),$$

wobei für die Funktion $\varphi_{\perp}(x, y)$ gilt:

$$\varphi_{\perp}(x, y) = e^{ik_y y}\varphi(x), \qquad p_y = \hbar k_y.$$

Zeigen Sie: Für die Funktion $\varphi(x)$ lautet die Bestimmungsgleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \frac{\hbar k_y q b}{m}x + \frac{b^2 q^2}{2m}x^2\right]\varphi(x) = E_{\perp}\varphi(x) \tag{1}$$

<u>**Lösung:**</u> Der Hamiltonoperator kann in zwei Komponenten zerlegt werden.

$$\begin{aligned} H &= H_{||} + H_{\perp} \\ &= \frac{\hat{p}_z}{2m} + \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_y^2 - 2qb\hat{p}_y\hat{x} + q^2b^2\hat{x}^2\right) \end{aligned}$$

Für die Schrödingergleichung erhalten wir

$$\begin{aligned} (H_{||} + H_{\perp})\varphi_{||}(z)\varphi_{\perp}(x, y) &= (E_{||} + E_{\perp})\varphi_{||}(z)\varphi_{\perp}(x, y) \\ \varphi_{\perp}(x, y)H_{||}\varphi_{||}(z) + \varphi_{||}(z)H_{\perp}\varphi_{\perp}(x, y) &= (E_{||} + E_{\perp})\varphi_{||}(z)\varphi_{\perp}(x, y) \\ \frac{1}{\varphi_{||}(z)}H_{||}\varphi_{||}(z) + \frac{1}{\varphi_{\perp}(x, y)}H_{\perp}\varphi_{\perp}(x, y) &= E_{||} + E_{\perp} \end{aligned}$$

Damit erhalten wir die Gleichungen

$$\begin{aligned} H_{||}\varphi_{||}(z) &= E_{||}\varphi_{||}(z) \\ H_{\perp}\varphi_{\perp}(x, y) &= E_{\perp}\varphi_{\perp}(x, y) \end{aligned}$$

In der Ortsdarstellung lautet die erste Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\varphi_{||}(z) = E_{||}\varphi_{||}(z)$$

Dies ist die Schrödingergleichung für ein freies Teilchen. Sie hat die Lösung

$$\varphi_{||}(z) = \exp(ik_z z) \qquad E_{||} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

Für die zweite Gleichung erhalten wir

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\hbar q b}{im}\frac{\partial}{\partial y}x + \frac{q^2b^2}{2m}x^2\right]e^{ik_y y}\varphi(x) &= E_{\perp}e^{ik_y y}\varphi(x) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \frac{\hbar q b k_y}{m}x + \frac{q^2b^2}{2m}x^2\right]e^{ik_y y}\varphi(x) &= E_{\perp}e^{ik_y y}\varphi(x) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} - \frac{\hbar q b k_y}{m}x + \frac{q^2b^2}{2m}x^2\right]\varphi(x) &= E_{\perp}\varphi(x) \quad \blacksquare \end{aligned}$$

e)**[2P.]** Lösen Sie die Eigenwertgleichung (1).

Hinweis: Verwenden Sie die Analogie der Eigenwertgleichung zum harmonischen Oszillator.

Lösung:

$$\begin{aligned}
\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{q^2b^2}{2m}\left(\frac{\hbar^2k_y^2}{q^2b^2}-\frac{2\hbar k_y}{qb}x+x^2\right)\right]\varphi(x) &= E_\perp\varphi(x) \\
\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{m}{2}\omega_c^2\left(x-x_0\right)^2\right]\varphi(x) &= E_\perp\varphi(x)
\end{aligned}$$

mit $x_0=\hbar k_y/qb$. Dies ist die Gleichung für einen harmonischen Oszillator mit der Lösung:

$$E_\perp=\hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right)$$
$$\varphi(x)=\varphi_n\left(x-x_0\right)$$

Die φ_n sind die Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators. ■

f)**[1P.]** Formulieren Sie die vollständige Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung.

Lösung:
Die vollständige Lösung lautet

$$E=E_{||}+E_\perp=\frac{\hbar k_z}{2m}+\hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right)$$
$$\Psi(x,y,z)=e^{ik_zz}e^{ik_yy}\varphi_n\left(x-\frac{\hbar k_y}{2m}\right)\quad ■$$

Aufgabe 2: [8P.]

Betrachten Sie den Gesamtdrehimpuls des Elektrons

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (S = \frac{1}{2},\ l \geq 1).$$

Zeigen Sie, dass für die gemeinsamen Eigenzustände $|j\, m_j\rangle := |l\, \frac{1}{2}; j\, m_j\rangle$ der Operatoren $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2$ gilt:

$$|l \pm \frac{1}{2}\, m_j\rangle = \sqrt{\frac{l \pm m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}|l\, m_j - \frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\, \frac{1}{2}\rangle \pm \sqrt{\frac{l \mp m_j + \frac{1}{2}}{2l+1}}|l\, m_j + \frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\, -\frac{1}{2}\rangle, \tag{2}$$

wobei $|l\, m_l\rangle|\frac{1}{2}\, m_s\rangle$ die Eigenzustände der Operatoren $\mathbf{L}^2, L_z, \mathbf{S}^2, S_z$ sind. Führen Sie dazu die folgenden Schritten aus:

a)**[1P.]** Zeigen Sie, dass für die Quantenzahl j nur die Werte $l + \frac{1}{2}$ und $l - \frac{1}{2}$ möglich sind.

Lösung:
Dreieckungsungleichung:

$$|l - \frac{1}{2}| \leq j \leq l + \frac{1}{2};$$

$$l = 0 \Rightarrow j = \frac{1}{2};$$

$$l \geq 1 \Rightarrow j = l + \frac{1}{2},\, l - \frac{1}{2} \qquad \blacksquare$$

b)**[1P.]** Betrachten Sie zuerst den Zustand $|l + \frac{1}{2}\, m_j\rangle$. Beweisen Sie, dass die Behauptung (2) für $m_j = l + \frac{1}{2}$ korrekt ist.

Lösung: Für $m = l + \frac{1}{2}$ lautet die Behauptung

$$|l + \frac{1}{2}\, l + \frac{1}{2}\rangle = |l\, l\rangle|\frac{1}{2}\, \frac{1}{2}\rangle \Rightarrow \text{korrekt.} \quad \blacksquare$$

c)**[1P.]** Mit Hilfe des Leiteroperators J_- überprüfen Sie, dass (2) für $m_j = l - \frac{1}{2}$ gilt.

Hinweis: Benutzen Sie die Formel

$$J_-|j\, m\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}|j\, m-1\rangle.$$

Lösung:

$$J_-|l + \frac{1}{2}\, l + \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{2l+1}|l + \frac{1}{2}\, l - \frac{1}{2}\rangle;$$

$$J_-|l\,l\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{2l}|l\,l-1\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle + |l\,l\rangle|\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}\rangle \Rightarrow$$
$$\Rightarrow |l+\frac{1}{2}\,l-\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}}|l\,l-1\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{2l+1}}|l\,l\rangle|\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}\rangle$$

Für $m_j = l - \frac{1}{2}$ (2) $\Leftrightarrow$

$$|l+\frac{1}{2}\,l-\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}}|l\,l-1\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{2l+1}}|l\,l\rangle|\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}\rangle \Rightarrow \text{korrekt} \quad \blacksquare$$

d)**[2P.]** Setzen Sie nun voraus, dass die Formel (2) für m_j korrekt ist und verifizieren Sie (2) für $m_j - 1$.

Lösung:

$$\begin{aligned}
J_- &= L_- + S_-, \\
J_-|l+\frac{1}{2}\,m_j\rangle &= \hbar\sqrt{(l+\frac{1}{2}+m_j)(l+\frac{1}{2}-m_j+1)}|l+\frac{1}{2}\,m_j-1\rangle, \\
J_-|l,m_j-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle &= \hbar|l\,m_j-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}\rangle + \hbar\sqrt{(l+m_j-\frac{1}{2})(l-m_j+\frac{3}{2})}|l\,m_j-\frac{3}{2}\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle, \\
J_-|l,m_j+\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}\rangle &= \hbar\sqrt{(l+m_j+\frac{1}{2})(l-m_j+\frac{1}{2})}|l\,m_j-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}\rangle.
\end{aligned}$$

Damit folgt:

$$|l+\frac{1}{2}\,m_j-1\rangle = \left(\sqrt{\frac{1}{(2l+1)(l-m_j+\frac{3}{2})}} + \frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{\sqrt{(2l+1)(l-m_j+\frac{3}{2})}}\right)|lm_j-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}\rangle +$$
$$+\sqrt{\frac{l+m_j-\frac{1}{2}}{2l+1}}|lm_j-\frac{3}{2}\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{l-m_j+\frac{3}{2}}{2l+1}}|lm_j-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{l+m_j-\frac{1}{2}}{2l+1}}|lm_j-\frac{3}{2}\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle.$$

Das ist die Behauptung (2) für $m_j - 1$. $\blacksquare$

Hinweis: Benutzen Sie den Leiteroperator J_-.

e)**[1P.]** Untersuchen Sie nun den Zustand $|l-\frac{1}{2}\,m_j\rangle$. Zeigen Sie, dass (2) für den Fall $m_j = l - \frac{1}{2}$ gültig ist.

Hinweis: Die Zustände $|j\,m_j\rangle$ sind orthonormiert.

Lösung:

$$|l-\frac{1}{2}\,l-\frac{1}{2}\rangle = \alpha|l\,l-1\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle + \beta|l\,l\rangle|\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}\rangle.$$
$$\langle l+\frac{1}{2}\,l-\frac{1}{2}|l-\frac{1}{2}\,l-\frac{1}{2}\rangle = 0 \Leftrightarrow \sqrt{\frac{2l}{2l+1}}\alpha + \sqrt{\frac{1}{2l+1}}\beta = 0$$

Außerdem

$$\alpha^2 + \beta^2 = 1.$$

Also

$$\alpha = \sqrt{\frac{1}{2l+1}}, \quad \beta = -\sqrt{\frac{2l}{2l+1}},$$

und somit

$$|l-\frac{1}{2}\, l-\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{2l+1}}|l\, l-1\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2l}{2l+1}}|l\, l\rangle|\frac{1}{2}\, -\frac{1}{2}\rangle.$$

Das ist die Behauptung (2) für $m_j = l - \frac{1}{2}$.■

f)**[2P.]** Nehmen Sie wieder an, dass die Behauptung für m_j korrekt ist und beweisen Sie (2) für $m_j - 1$.

<u>**Hinweis:**</u> Benutzen Sie den Hinweis zu d).

<u>**Lösung:**</u>

$$\begin{aligned}
J_-|l-\frac{1}{2}\, m_j\rangle &= \hbar\sqrt{(l-\frac{1}{2}+m_j)(l+\frac{1}{2}-m_j)}|l-\frac{1}{2}\, m_j-1\rangle, \\
J_-|l, m_j-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle &= \hbar|l\, m_j-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\, -\frac{1}{2}\rangle + \hbar\sqrt{(l+m_j-\frac{1}{2})(l-m_j+\frac{3}{2})}|l\, m_j-\frac{3}{2}\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle, \\
J_-|l, m_j+\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\, -\frac{1}{2}\rangle &= \hbar\sqrt{(l+m_j+\frac{1}{2})(l-m_j+\frac{1}{2})}|l\, m_j-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\, -\frac{1}{2}\rangle.
\end{aligned}$$

Damit folgt:

$$|l-\frac{1}{2}\, m_j-1\rangle = \left(\sqrt{\frac{1}{(2l+1)(l+m_j-\frac{1}{2})}} - \sqrt{\frac{(l+m_j+\frac{1}{2})^2}{(2l+1)(l+m_j-\frac{1}{2})}}\right)|lm_j-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\, -\frac{1}{2}\rangle +$$

$$+\sqrt{\frac{l-m_j+\frac{3}{2}}{2l+1}}|lm_j-\frac{3}{2}\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{l-m_j+\frac{3}{2}}{2l+1}}|lm_j-\frac{3}{2}\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{l+m_j-\frac{1}{2}}{2l+1}}|lm_j-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\, -\frac{1}{2}\rangle.$$

Das ist die Behauptung für $m_j - 1$.■

Aufgabe 3: [6 P.]

Betrachten Sie ein Wasserstoffatom im homogenen elektrischen Feld

$$\boldsymbol{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\boldsymbol{e}_z.$$

Dieses Feld soll als Störung W angesehen werden.

a)[**1P.**] Stellen Sie den Hamilton-Operator in Kugelkoordinaten auf.

Lösung:

Potentielle Energie des Elektrons im homogenen elektrischen Feld:

$$V(\mathbf{r}) = V(z) = e\mathcal{E}z.$$

Also

$$H = H_0 + W = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle - \frac{e^2}{r} + e\mathcal{E}z.$$

In Kugelkoordinaten:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) - \frac{e^2}{r} + e\mathcal{E}r\cos\theta \quad \blacksquare$$

b)[**3P.**] Berechnen Sie in erster Ordnung Störungstheorie die Energiekorrekturen für die zwei niedrigsten Enegieniveaus des Wasserstoffatoms.

Hinweis: Die Lösung des ungestörten Problems kann dabei als bekannt angesehen werden:

$$\begin{aligned}
|nlm\rangle &= R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi),\\
Y_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \quad Y_1^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi},\\
R_{10} &= \sqrt{\frac{4}{a_H^3}}e^{-r/a_H}, \quad R_{20} = \sqrt{\frac{1}{2a_H^3}}\left(1 - \frac{r}{2a_H}\right)e^{-r/2a_H}, \quad R_{21} = \sqrt{\frac{1}{24a_H^3}}\frac{r}{a_H}e^{-r/2a_H},\\
E_n^0 &= -\frac{R_H}{n^2}, \quad R_H = \frac{\hbar^2}{2\mu a_H^2}, \quad a_H = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}, \quad \mu = \frac{m_e}{1 + m_e/m_p}.
\end{aligned}$$

Verwenden Sie auch die Eigenschaft

$$\langle n'\, l'\, m'|W|n\, l\, m\rangle \neq 0 \quad \text{höchstens für} \quad m' = m,\; l' = l \pm 1.$$

sowie die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\rho\, \rho^n e^{-\rho} = n!, \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

Lösung:
1) $n = 1 \Rightarrow l = 0,\, m = 0$ (keine Entartung)

$$\begin{aligned} E_n &= E_n^0 + \epsilon E_n^1 + \ldots; \\ E_n^1 &= \langle 1\,0\,0|W|1\,0\,0\rangle = 0. \quad \text{(sieh Hinweis);} \\ E_1 &= E_1^0 = -R_H. \end{aligned}$$

1) $n = 2 \Rightarrow l = 0,\, 1, \quad m = l,\, l-1 \ldots - l$ (Entartung)
Sei

$$|\psi_1\rangle = |200\rangle; \quad |\psi_2\rangle = |210\rangle; \quad |\psi_3\rangle = |211\rangle; \quad |\psi_4\rangle = |21-1\rangle;$$

Die Störungstheoretischen Energiekorrekturen erster Ordnung E_{2i}^1, $i = 1, 2, 3, 4$ werden durch "diagonalidieren" der 4×4 Matrix

$$V = [\langle \psi_{i'}|W|\psi_i\rangle, \quad i,\, i' = 1, 2, 3, 4]$$

des Störoperators W im Eigenraum zu E_2^0. Mit Hilfe des Hinweises stellt man fest, dass eine Anzahl von Elementen von V null ist und nur die Matrixelemente $V_{12} = \langle 200|W|210\rangle$ und $V_{21}^* = V_{12}$ von null verschieden sein könnten.

$$\begin{aligned} V_{12} = e\mathcal{E} \int_0^\infty r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi R_{20} r R_{21} Y_0^{0*} \cos\theta Y_1^0 = \Big|\rho = \\ = \frac{r}{a_H}\Big| = e\mathcal{E}\frac{a_H}{4\sqrt{3}} \int_0^\infty \rho^4 (1 - \frac{\rho}{2}) e^{-\rho} d\rho \int_0^\pi \frac{\sqrt{3}}{2} \cos^2\theta \sin\theta d\theta = \\ e\mathcal{E}\frac{a_H}{4\sqrt{3}} \frac{\sqrt{3}}{3} (4! - \frac{5!}{2}) = -3e\mathcal{E}a_H, \end{aligned}$$

und somit folgt

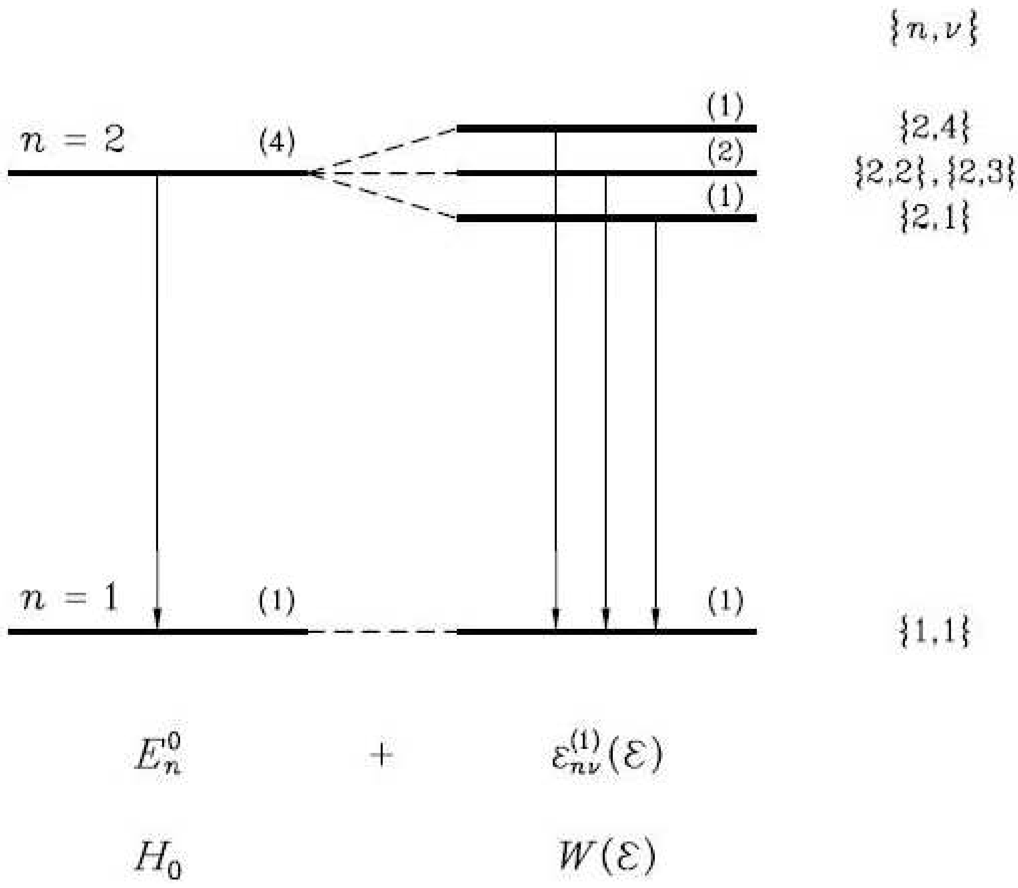
$$V = -3e\mathcal{E}a_H \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Bestimmung der Eigenwerte von V: Säkulargleichung:

$$\begin{aligned} \det(V - E_{2i}^1 \mathbb{I}) &= 0, \quad i = 1, 2, 3, 4 \Leftrightarrow \\ E_{21}^1 &= -3e\mathcal{E}a_H; \\ E_{22}^1 &= E_{23}^1 = 0; \quad E_2 = E_2^0 + E_{2i}^1 \quad i = 1, 2, 3, 4. \\ E_{24}^1 &= 3e\mathcal{E}a_H; \quad \blacksquare \end{aligned}$$

c)**[2P.]** Zeichnen Sie die in erster Ordnung Störungstheorie erhaltenen Energien für eine vorgegebene elektrische Feldstärke $\mathcal{E}$. Welche Aufspaltung zum Übergang $n = 2 \to n = 1$ ergibt sich somit in einem schwachen elektrischen Feld?

Lösung:
Wie man sieht, spaltet die Linie, die zum Übergang $n = 2 \to n = 1$ gehört für ein schwaches elektrisches Feld in drei Linien auf, wobei die Größe der Aufspaltung zur elektrischen Feldstärke proportional ist.$\blacksquare$


{n,ν}
(1)
{2,4}
n = 2
(4)
(2)
{2,2}, {2,3}
(1)
{2,1}
n = 1
(1)
(1)
{1,1}
E_n^0
+
ε_nν^(1)(ℰ)
H_0
W(ℰ)

Aufgabe 4: [**P.**]

Der Hamiltonoperator des anharmonischen linearen Oszillators sei durch

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \frac{m^2\omega^3}{10\hbar}x^4$$

gegeben. Mittels des Variationsverfahrens von Rayleigh-Ritz soll die Grundzustandenergie nährungsweise berechnet werden.

a)[**1P.**] Benutzen Sie den Ansatz

$$\{u(x;\alpha) = \sqrt{N}e^{-\alpha x^2}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad \alpha \in \mathbb{R}^+\}$$

für die Versuchsfunktionenschar. Bestimmen Sie zuerst die Normierungskonstante N.

Lösung:

$$\langle u(\alpha)|u(\alpha)\rangle = 2N\int_0^\infty dx\, e^{-2\alpha x^2} = N\sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} = 1 \Leftrightarrow N = \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}.$$

b)[**2P.**] Berechnen Sie nun das Energiefunktional
$E(\alpha) := \langle H\rangle_u$.

Lösung:

$$E(\alpha) = \langle H\rangle_u = \frac{\langle u(\alpha)|H|u(\alpha)\rangle}{\langle u(\alpha)|u(\alpha)\rangle}$$

Mit der Testfunktionenschar $u(\alpha) = e^{-\alpha x^2}$ und dem Hamilton-Operator

$$H = \frac{1}{2}(P^2 + X^2) + \frac{1}{10}X^4$$

ergibt sich dann

$$\begin{aligned}
\langle u(\alpha)|H|u(\alpha)\rangle &= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int dx\, e^{-\alpha x^2}\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{10}\right]e^{-\alpha x^2} \\
&= \sqrt{\frac{2\alpha}{\pi}}\int dx\, \left[\alpha - (2\alpha^2 - \frac{1}{2})x^2 + \frac{x^4}{10}\right]e^{-2\alpha x^2} \\
&= \left[\frac{\alpha}{2} + \frac{1}{8\alpha} + \frac{3}{160\alpha^2}\right]
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich für die variierte Energie

$$E(\alpha) = \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{8\alpha} + \frac{3}{160\alpha^2} \quad \blacksquare$$

c)**[2P.]** Für welches $\alpha = \alpha_{min}$ wird $E(\alpha)$ minimal?

<u>**Lösung:**</u>

$$\frac{dE(\alpha)}{\alpha} = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha^3 - \frac{\alpha}{4} - \frac{3}{40} = 0.$$

Mit

$$p = -\frac{1}{12}, \qquad q = -\frac{3}{80} \qquad \Rightarrow \qquad p^3 + q^2 > 0$$

erhält man somit für die reelle Wurzel $\alpha = \alpha_{min}$.

$$\begin{aligned}
\sin\varphi &= \frac{10}{9\sqrt{3}}, \quad \cos\varphi = \frac{\sqrt{143}}{9\sqrt{3}}; \\
\tan\frac{\varphi}{2} &= \frac{2}{\cos\varphi + 1} - 1 = \left(\frac{10}{9\sqrt{3}+\sqrt{143}}\right)^2, \quad \tan\psi = \left(\frac{10}{9\sqrt{3}+\sqrt{143}}\right)^{2/3}; \\
\sin 2\psi &= -\frac{2\sqrt{\tan\psi}}{\tan\psi + 1}, \\
\alpha_{min} &= \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(\frac{10}{\sqrt{243}+\sqrt{143}}\right)^{-\frac{1}{3}}\left[1 + \left(\frac{10}{\sqrt{243}+\sqrt{143}}\right)^{\frac{2}{3}}\right] = 0.610598 \quad \blacksquare
\end{aligned}$$

d)**[1P.]** Bestimmen Sie die minimale Energie $E(\alpha_{min})$. Vergleiche mit der exakten Grundzustandenergie $E_0 = 0.559146$ und kommentierte das Ergebnis.

<u>**Lösung:**</u>
Die gesuchte Energie:

$$E(\alpha_0) = 0.560307$$

Der gefundene Näherungswert weicht nur um 0.2% von der exakten Grundzustandsenergie ab. $\blacksquare$

<u>**Hinweis:**</u> Verwenden Sie für die Rechnung Einheiten mit $\hbar = m = \omega = 1$. Benutzen Sie auch die Formel

$$\int_0^{+\infty} d\xi\, \xi^{2n} e^{-\beta\xi^2} = \frac{(2n)!}{2^{2n+1} n! \beta^n}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}, \quad \beta \in \mathbb{R}^+, \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

Benutzen Sie auch die Eigenschaft, dass die kubische Gleichung $y^3 + 3py + 2q = 0$ im Falle $p^3 + q^2 > 0$ nur eine reelle Lösung besitzt. Außerdem gilt es für $p < 0$:

$$y = -\frac{2\sqrt{-p}}{\sin 2\psi}, \quad \tan\psi = \sqrt[3]{\tan\frac{\varphi}{2}}, \quad \sin\varphi = \frac{\sqrt{-p^3}}{q}, \quad -\frac{\pi}{4} < \psi < \frac{\pi}{4}, \quad -\frac{\pi}{2} < \varphi < \frac{\pi}{2}.$$