Fakultät für Physik
C. Ewerz

Universität Bielefeld
Wintersemester 2007/08

2. Übung zur Quantenmechanik II

Abgabe der schriftlichen Aufgaben: 2.11.2007
Besprechung der Präsenzaufgaben: 5.11.2007

S 3 Linearer Stark-Effekt (10 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

$$\mathbf{W} = e\phi(\vec{x}) = -ex_3 E \tag{1}$$

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.

P 4 Ritzsches Variationsverfahren (10 Punkte)

Wir wollen ein quantenmechanisches Problem mit dem Hamiltonoperator $\mathbf{H}$ betrachten. Dabei wollen wir (der Einfachheit halber) annehmen, daß $\mathbf{H}$ ein diskretes Spektrum besitzt,

$$\mathbf{H} \,|\phi_n\rangle = E_n \,|\phi_n\rangle \qquad (n \in \mathbb{N})\,, \tag{2}$$

wobei die $|\phi_n\rangle$ orthonormierte Eigenzustände seien. E_0 sei die Energie des Grundzustands, die wir abschätzen wollen.

(a) Sei $|\psi\rangle$ ein beliebiger (nicht notwendig normierter) Zustand im Hilbertraum $\mathcal{H}$. Zeigen Sie

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi \,|\, \mathbf{H}\psi \rangle}{\langle \psi \,|\, \psi \rangle} \geq E_0\,. \tag{3}$$

Wann ist die Gleichheit erfüllt?
Hinweis: Betrachten Sie $\langle \psi \,|\, \mathbf{H}\psi \rangle$ und entwickeln Sie $|\psi\rangle$ in das vollständige System $\{|\phi_n\rangle\}$ von Eigenzuständen.

Beachten Sie, daß die exakten Eigenzustände und Eigenwerte von $\mathbf{H}$ in dieser Gleichung nicht mehr auftreten. Es ist also für die Abschätzung nicht notwendig, diese explizit zu kennen.
Auf diese Weise erhält man für jeden beliebig gewählten Zustand $|\psi\rangle$ eine obere Grenze für die exakte Grundzustandsenergie. Meistens arbeitet man im Ortsraum, und bezeichnet dann $\psi(\vec{x})$ als Testfunktion. Die Abschätzung wird natürlich von der Wahl der Testfunktion abhängen und um so besser sein, je ähnlicher die Testfunktion der exakten Wellenfunktion des Grundzustands ist. Um eine optimale Abschätzung zu erhalten, wählt man im allgemeinen eine Schar von Zuständen, indem man Testfunktionen mit einem oder mehreren Parametern verwendet. Man variiert dann diese Parameter, um die linke Seite der Ungleichung (3) zu minimieren und so eine optimale Abschätzung für E_0 zu erhalten. (Daher stammt auch der Name des Verfahrens.)
Um ein Gefühl für die Qualität des Verfahrens zu bekommen, wollen wir es nun zunächst auf Probleme anwenden, deren exakte Lösung uns bekannt ist. In der Praxis wird man es natürlich gerade dort anwenden, wo dies nicht der Fall ist, z. B. beim Heliumatom.

(b) Wir betrachten das Kastenpotential ($a \in \mathbb{R}_+$)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } |x| < a \\ \infty & \text{für } a \leq |x|\,. \end{cases} \tag{4}$$

Geben Sie die exakte Grundzustandsenergie und die zugehörige Wellenfunktion an. Berechnen Sie $E[\psi]$ für die Testfunktion

$$\psi(x) = a^2 - x^2 \tag{5}$$

und zeigen Sie, daß dieser einfache Ansatz ein Ergebnis liefert, das nur um 1.3% vom exakten Wert abweicht. Welche wichtigen Eigenschaften hat diese Testfunktion mit der exakten Wellenfunktion gemeinsam?

(c) Um die Abschätzung aus (b) noch zu optimieren, betrachten wir jetzt eine Schar von Funktionen mit einem reellen Parameter $\lambda \in \mathbb{R}$,

$$\psi(x) = |a|^\lambda - |x|^\lambda\,. \tag{6}$$

Finden Sie eine optimale Abschätzung, indem Sie $E[\psi]$ durch Variation von λ minimieren. Wie stark weicht dieses Minumum vom exakten Wert ab?

(d) Sei nun **H** der Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms, d. h. der Hamiltonoperator für die Bewegung eines Elektrons der Ladung $-e_0$ und der Masse m im Coulombpotential einer Kernladung Ze_0. Als Testfunktion wählen wir die (normierte) Grundzustandswellenfunktion eines dreidimensionalen harmonischen Oszillators mit dem Potential $\frac{1}{2}m\omega^2 r^2$,

$$\psi_0(\vec{x}) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right) . \tag{7}$$

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

$$\langle \psi_0 \,|\, \mathbf{H}\psi_0 \rangle = \frac{3}{4}\hbar\omega - \frac{2Ze_0^2}{\hbar}\left(\frac{m\hbar\omega}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} . \tag{8}$$

(e) Beweisen Sie Gl. (8) aus Teil (d).

Weitere Informationen unter:
http://www.thphys.uni-heidelberg.de/∼ewerz/qm2-0708.html