Institut für Theoretische Physik
C. Ewerz, E. Thommes

Universität Heidelberg
Sommersemester 2010

13. Übung zur Quantenmechanik

Abgabe der schriftlichen Aufgaben: 13.07.2010
Besprechung der Präsenzaufgaben: 08./09.07.2010

P 49 Zeitumkehroperator für Teilchen ohne Spin (4 Punkte)

Wir betrachten Teilchen ohne Spin mit dem Hamiltonoperator $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})$. Der Zeitumkehroperator $\mathcal{T}$ sei definiert durch

$$\mathcal{T}\psi(\vec{x},t) = \psi^*(\vec{x},-t)\,. \tag{1}$$

(a) Zeigen Sie, daß der Zeitumkehroperator $\mathcal{T}:\psi \to \psi'$ antiunitär ist, d. h. (i) er ist antilinear, und (ii) es gilt für ein hermitesches Skalarprodukt $\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\phi\rangle$.

(b) Zeigen Sie: Falls $\psi(\vec{x},t)$ eine Lösung der Schrödingergleichung ist, so ist auch $\psi'(\vec{x},t) = \mathcal{T}\psi$ eine Lösung.

S 50 Dipolübergänge im Wasserstoffatom (optional, +20 Punkte)

Wir betrachten ein Wasserstoffatom mit Hamiltonoperator $\mathbf{H}_0 = \vec{\mathbf{P}}^2/(2m) - e^2/r$ in einem zeitabhängigen elektromagnetischen Feld. Wir nehmen an, daß das relevante Feld als eine Wellenfront beschrieben werden kann, die sich in eine vorgegebene Richtung $\vec{n} = c\vec{k}/\omega$ ausbreitet, d. h. mit $\vec{k}_\omega = \vec{n}\,\omega/c$

$$\vec{A}(\vec{x},t) = \int d\omega\, \vec{A}_0(\omega)\left(e^{i(\vec{k}_\omega\cdot\vec{x}-\omega t)} + e^{-i(\vec{k}_\omega\cdot\vec{x}-\omega t)}\right)\,. \tag{2}$$

Im folgenden soll die Coulomb-Eichung $\nabla\cdot\vec{A} = 0$ gewählt werden.

(a) Geben Sie den Hamiltonoperator des Atoms im elektromagnetischen Feld an und bestimmen Sie die Wechselwirkung $\mathbf{H}'(t)$ mit dem elektromagnetischen Feld in erster Ordnung in $\vec{A}$.

(b) Zeigen Sie, daß in der sog. Langwellennäherung $\vec{k}_\omega\cdot\vec{x} \ll 1$ die Wechselwirkung $\mathbf{H}'(t)$ für den Fall der Absorption die Form

$$\mathbf{H}'(t) = \frac{i}{\hbar c}\int d\omega\, e^{-i\omega t}\left[\vec{\mathbf{d}},\mathbf{H}_0\right]\cdot\vec{A}_0(\omega) \tag{3}$$

hat, wobei $\vec{\mathbf{d}} = e\vec{x}$ der Dipoloperator ist. Diese Form ist dann die Wechselwirkung in der sog. Dipolnäherung. Zeigen Sie, daß die Dipolnäherung für Übergänge von atomaren Systemen im Bereich sichtbaren Lichts gültig ist.
Hinweis: Beachten Sie, daß $[\vec{\mathbf{d}},\mathbf{H}_0] = -ie\hbar\vec{\mathbf{P}}/m$ (warum?).

Die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen zwei Zuständen $|i\rangle$ und $|f\rangle$ ist gegeben durch

$$W_{fi} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, e^{i\omega_{fi}t} \langle f|\mathbf{H}'(t)|i\rangle \right|^2 , \tag{4}$$

wobei $\omega_{fi} = (E_f - E_i)/\hbar$.

(c) Leiten Sie die Auswahlregeln für Dipolübergänge (sog. E1-Übergänge, E steht für elektrisch) aus dem Grundzustand her für den Fall, daß $\vec{A}$ in z-Richtung liegt, $\vec{A}_0(\omega) = (0, 0, A_0(\omega))$
Hinweis: Betrachten Sie dazu die Matrixelemente von $[\mathbf{d}_z, \mathbf{H}_0]$ zwischen dem Grundzustand ψ_{100} und anderen Wasserstoffeigenzuständen ψ_{nlm}, die sich darstellen lassen als $\psi_{nlm}(\vec{x}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$. Nutzen Sie dann Ihre Kenntnisse der Kugelflächenfunktionen für die Auswertung der Winkelintegration.

(d) Zeigen Sie, daß mit $\mathbf{H}'(t)$ aus (b) für die Übergangswahrscheinlichkeit folgt (mit $z = x_3$):

$$W_{fi} = \left(\frac{e}{\hbar c}\right)^2 \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)^2 |A_0(\omega_{fi})|^2 \, |\langle f|[z, \mathbf{H}_0]|i\rangle|^2 . \tag{5}$$

(e) Berechnen Sie W_{fi} für den 1s→2p- und für den 1s→3p-Übergang im Wasserstoffatom. Vergleichen Sie die Übergangswahrscheinlichkeiten unter der Annahme, daß $A_0(\omega_{21}) = A_0(\omega_{31})$.
Hinweis: Die relevanten radialen Wasserstoffwellenfunktionen sind mit dem Bohrschen Radius a gegeben durch:

$$R_{1s}(r) = 2\, a^{-3/2} \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \tag{6}$$

$$R_{2p}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\, a^{-3/2}\, \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \tag{7}$$

$$R_{3p}(r) = \frac{8}{27\sqrt{6}}\, a^{-3/2}\, \frac{r}{a} \left(1 - \frac{r}{6a}\right) \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) . \tag{8}$$

Außerdem gilt

$$\int_0^{\infty} dx\, x^n \exp\left(-\frac{x}{b}\right) = n!\, b^{n+1} . \tag{9}$$

S 51 Summenregel von Thomas-Reiche-Kuhn (optional, +5 Punkte)

Die sog. Oszillatorstärke ist mit den Bezeichnungen aus Aufg. 50 definiert als

$$f_{ni} = \frac{2m}{\hbar e^2}\, \omega_{ni}\, |\langle n|\mathbf{d}_z|i\rangle|^2 . \tag{10}$$

Sie beschreibt die Absorptionswahrscheinlichkeit eines Photons am Wasserstoffatom.

(a) Zeigen Sie

$$\sum_n f_{ni} = \frac{m}{\hbar^2 e^2} \langle i|[[\mathbf{d}_z, \mathbf{H}_0], \mathbf{d}_z]|i\rangle . \tag{11}$$

(b) Beweisen Sie die Summenregel für die Oszillatorstärken $\sum_n f_{ni} = 1$.
Hinweis: Beachten Sie einen früheren Hinweis.

S 52 Helium-Atom (optional, +6 Punkte)

Der Hamiltonoperator des Helium-Atoms ist

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^{(1)} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta^{(2)} - \frac{2e_0^2}{r^{(1)}} - \frac{2e_0^2}{r^{(2)}} + \frac{e_0^2}{|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|}\,, \tag{12}$$

wobei m die Elektronmasse und $-e_0$ die Ladung des Elektrons. Die Indizes in Klammern beziehen sich auf die beiden Elektronen, $r^{(1)} = \left|\vec{x}^{(1)}\right|$, $r^{(2)} = \left|\vec{x}^{(2)}\right|$. Der Hilbertraum dieses Problems wird im Ortsraum durch Zweiteilchen-Wellenfunktionen $\phi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$ aufgespannt. Aufgrund der Wechselwirkung der Elektronen (vgl. den letzten Term in Gl. (12)) kann dieses Problem nicht exakt gelöst werden. Wir wollen deshalb das Ritzsche Variationsverfahren anwenden, um die Grundzustandsenergie abzuschätzen.

Als einfache Testfunktion wollen wir das Produkt zweier Einteilchen-Wellenfunktionen ansetzen, die jeweils Eigenzustände des Coulombproblems beschreiben. Es erscheint physikalisch sinnvoll anzunehmen, daß das Feld des Kerns teilweise 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

$$\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = \psi_{100}^{Z_{\text{eff}}}(\vec{x}^{(1)})\psi_{100}^{Z_{\text{eff}}}(\vec{x}^{(2)}) \tag{13}$$

worin

$$\psi_{100}^{Z}(\vec{x}) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}}\,\exp\left(\frac{-Zr}{a_0}\right) \tag{14}$$

die normierte Grundzustandswellenfunktion für das Coulombproblem mit der Kernladung Z ist. (Beachten Sie, daß damit $\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$ auf 1 normiert ist.) Finden Sie eine optimale Abschätzung für die Grundzustandsenergie des Heliumatoms, indem Sie Z_{eff} variieren.

Hinweis:

$$\int d^3x^{(1)} d^3x^{(2)} \left|\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})\right|^2 \frac{e_0^2}{|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|} = \frac{5}{8}\frac{Z_{\text{eff}} e_0^2}{a_0} \tag{15}$$

Bemerkung: Der mit dem Ritzschen Variationsverfahren gewonnene Wert für die Grundzustandsenergie liegt um 2.7 eV näher am experimentell gemessenen Wert ($E_0 = -78.8\,\text{eV}$) als der in Störungstheorie 1. Ordnung gewonnene Wert, wenn man die Wechselwirkung der Elektronen als Störung betrachtet.

Weitere Informationen unter:
http://www.thphys.uni-heidelberg.de/∼ewerz/qm10.html