

**Aufgabe 1: Variationsrechnung** (6 Punkte)

Die Grundzustandsenergie des dreidimensionalen Wasserstoffproblems soll mittels eines Variationsansatzes genähert werden. Verwenden Sie hierzu die Testwellenfunktion

$$\Psi(\vec{r}) = Ne^{-\frac{r^2}{a^2}}, \quad |\vec{r}| = r.$$

Der Variationsparameter ist  $a \in \mathbb{R}$ .

- Bestimmen Sie den Normierungsfaktor  $N$  so, dass die gegebene Wellenfunktion die Norm Eins erhält.
- Geben Sie die kinetische und die potentielle Energie als Funktion des Variationsparameters  $a$  an.
- Für welchen Wert des Parameters  $a$  wird die Gesamtenergie minimal?
- Vergleichen Sie diesen Energiewert mit dem exakten Ergebnis für die Grundzustandsenergie des Wasserstoffproblems. Wie groß ist der Fehler?

Hinweis: für  $\text{Re}(c) > 0$  gilt:

$$\int_0^\infty x \exp(-cx^2) dx = \frac{1}{2c}; \quad \int_0^\infty x^2 \exp(-cx^2) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{4\sqrt{c^3}}; \quad \int_0^\infty x^3 \exp(-cx^2) dx = \frac{1}{2c^2}$$

**Aufgabe 2: Spin-Bahn-Kopplung** (6 Punkte)

Für den Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1)$$

haben alle Zustände mit gleicher Hauptquantenzahl  $n$  denselben Energieeigenwert.

- Berechnen Sie die Anzahl der entarteten Zustände für ein beliebiges  $n$ .
- Welchen Einfluss hat die Spin-Bahn Kopplung ( $s=1/2$ ),

$$\hat{H}_{LS} = \kappa(\hat{L} \cdot \hat{S}), \quad (2)$$

auf diese Entartung? Geben Sie die Energieverschiebungen in Abhängigkeit von  $l$  an, welche aufgrund der Spin-Bahn Kopplung entstehen.

- Betrachten Sie nun  $n = 3$ . Berechnen und skizzieren Sie die resultierenden Energieniveaus und geben Sie für jedes Niveau den Entartungsgrad an. Beachten Sie, dass

$$\kappa \propto \frac{1}{n^3 l(l+1)(2l+1)} \quad (3)$$

gilt.

**Aufgabe 3: Linearer Stark-Effekt****(8 Punkte)**

Der Stark-Effekt ist das Analogon zum Zeeman-Effekt und beschreibt die Aufspaltung der Spektrallinien in einem statischen, elektrischen Feld. Zum ungestörten Wasserstoff-Hamiltonoperator

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad (4)$$

kommt ein elektrisches Störpotential

$$\hat{H}_1 = e\vec{r} \cdot \vec{E} \quad (5)$$

hinzu. Das Feld zeige in  $z$ -Richtung, sodass  $\vec{E} = E\vec{e}_z$ .

- (a) Im Grundzustand gilt  $|nlm\rangle = |100\rangle$  sowie  $E_1^{(0)} = -e^2/2a_0$ , wobei  $E_n^{(j)}$  die Energie des  $n$ -ten Niveaus in  $j$ -Ordnung Störungstheorie ist. Berechnen Sie über  $\langle 100|\hat{H}_1|100\rangle$  die Verschiebung der Grundzustandsenergie in erster Ordnung der elektrischen Störung.
- (b) Betrachten Sie die im ungestörten System 4-fach entarteten Zustände mit  $n = 2$ . Wie lauten diese entarteten Zustände? Um Störungstheorie anwenden zu können, muss zunächst der entartete Unterraum diagonalisiert werden. Argumentieren Sie mithilfe der Parität der Wellenfunktion, dass nur zwei identische Außerdiagonalelemente übrigbleiben. Hinweis: Es gilt  $[L_z, H_1] = 0$ .
- (c) Berechnen Sie explizit dieses Matrixelement, d.h. eines der identischen Außerdiagonalelemente aus b) in Ortsdarstellung mit den Ihnen bekannten, ungestörten Wellenfunktionen:

$$\Psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{a_0^3} \exp\left\{\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\right\} \cdot \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \quad (6)$$

$$\Psi_{210} = \frac{3}{4\pi} \cos\theta \frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} \exp\left\{\left(-\frac{r}{2a_0}\right)\right\} \frac{r}{a_0} \quad (7)$$

- (d) Diagonalisieren Sie nun den entarteten Unterraum aus b) und bestimmen Sie die Energiekorrektur und die neuen Eigenzustände des gestörten Hamiltonoperators in erster Ordnung Störungstheorie.

**Webseite zur Vorlesung:**

<http://people.het.physik.tu-dortmund.de/~ghiller/TH2-SS2017.html>