**Übungen zur Modernen Theoretischen Physik I SS 15**

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Dr. Andreas Poenicke, Patrik Hlobil

**Blatt 12 (Lösungen)**
**Abgabe: 14.07.2015, Besprechung: 15.07.2015**

---

## 1. Zeeman-Aufspaltung

Der Hamiltonoperator für ein Atom im Magnetfeld $\vec{B} = B\vec{e}_z$ ist gegeben durch

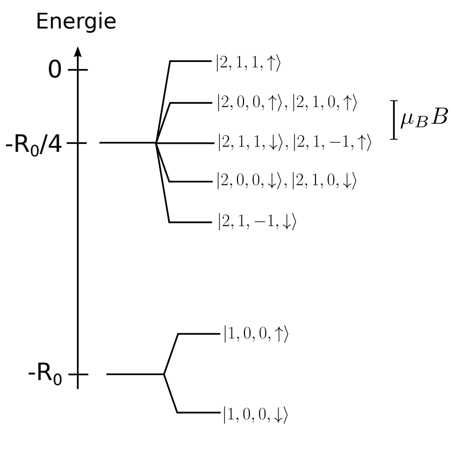
$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \underbrace{\frac{e}{2mc}}_{\mu_B}(\vec{L} + 2\vec{s})\vec{B} = \hat{H}_0 + \mu_B B(\hat{L}_z + 2\hat{s}_z) \tag{1}$$

wobei $\vec{L}$ der Bahndrehimpulsoperator und $\vec{s}$ der Spinoperator des Elektrons ist. $\hat{H}_0$ ist der ungestörte Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms. Für die Energieniveaus gilt nun

$$\begin{aligned} E_{n,l,m,s} &= \langle n,l,m,s \,|\, \hat{H} \,|\, n,l,m,s\rangle = \underbrace{\langle n,l,m,s \,|\, \hat{H}_0 \,|\, n,l,m,s\rangle}_{-R_0^2/n^2} + \mu_B B \underbrace{\langle n,l,m,s \,|\, \hat{L}_z + 2\hat{s}_z \,|\, n,l,m,s\rangle}_{m+2s} \\ &= -\frac{R_0}{n^2} + \mu_B B(m+2s) \end{aligned} \tag{2}$$

wobei $R_0$ die Rydberg-Energie ist. Für $n = 1$ und $n = 2$ haben wir insgesamt 10 mögliche Zustände mit Energien

$$\begin{aligned} E_{1,0,0,\uparrow} &= -R_0 + \mu_B B \\ E_{1,0,0,\downarrow} &= -R_0 - \mu_B B \\ E_{2,0,0,\uparrow} &= -R_0/4 + \mu_B B \\ E_{2,0,0,\downarrow} &= -R_0/4 - \mu_B B \\ E_{2,1,0,\uparrow} &= -R_0/4 + \mu_B B \\ E_{2,1,0,\downarrow} &= -R_0/4 - \mu_B B \\ E_{2,1,1,\uparrow} &= -R_0/4 + 2\mu_B B \\ E_{2,1,1,\downarrow} &= -R_0/4 \\ E_{2,1,-1,\uparrow} &= -R_0/4 \\ E_{2,1,-1,\downarrow} &= -R_0/4 - 2\mu_B B \end{aligned} \tag{3}$$




Die Zeeman-Aufspaltung kann man wie nebenstehend graphisch darstellen.

## 2. Anharmonischer Oszillator

(a) Wie wir wissen, besitzt der ungestörte harmonische Oszillator die Eigenenergien[1] $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ und die Eigenzustände $|n\rangle$ mit $n = 0, 1, \ldots$ , welche wir durch die Leiteroperatoren:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left[\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right] \qquad \text{und} \qquad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left[\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right]. \tag{4}$$

beeinflussen können:

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{5}$$

[1] Wir lassen hier im Vergleich zur Vorlesung den Index (0) weg, also $|n\rangle := |n^{(0)}\rangle$ und $E_n := E_n^{(0)}$.

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{6}$$

Da wir die Matrixelemente $V_{nm}$ später allgemein brauchen, rechnen wir diese nun aus:

$$V_{nm} = \gamma\langle\, n \mid \hat{x}^4 \mid m\rangle = \gamma\sum_k \langle\, n \mid \hat{x}^2 \mid k\rangle\langle\, k \mid \hat{x}^2 \mid m\rangle \tag{7}$$

Wir benötigen nun

$$\begin{aligned}\langle\, n \mid \hat{x}^2 \mid m\rangle &= \frac{x_0^2}{2}\langle\, n \mid (\hat{a}+\hat{a}^\dagger)^2 \mid m\rangle \\ &= \frac{x_0^2}{2}\Big[\sqrt{m(m-1)}\delta_{n,m-2} + \sqrt{(m+1)(m+2)}\delta_{n,m+2} + (2n+1)\delta_{n,m}\Big]\end{aligned} \tag{8}$$

wobei $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Damit folgt:

$$\begin{aligned}V_{nm} &= \gamma\sum_k \langle\, n \mid \hat{x}^2 \mid k\rangle\langle\, k \mid \hat{x}^2 \mid m\rangle \\
&= \gamma\frac{x_0^4}{4}\sum_k \Bigg[\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{n,k-2} + \sqrt{n(n-1)}\delta_{n,k+2} + (2n+1)\delta_{n,k}\Bigg] \\
&\qquad \Bigg[\sqrt{m(m-1)}\delta_{k,m-2} + \sqrt{(m+1)(m+2)}\delta_{k,m+2} + (2m+1)\delta_{k,m}\Bigg] \\
&= \frac{\gamma x_0^4}{4}\Bigg[\underbrace{\sqrt{(n+1)(n+2)}\sqrt{m(m-1)}\sum_k \delta_{n,k-2}\delta_{k,m-2}}_{\sqrt{m(m-1)(m-2)(m-3)}\delta_{n,m-4}} \\
&\qquad + \underbrace{\sqrt{(n+1)(n+2)}\sqrt{(m+1)(m+2)}\sum_k \delta_{n,k-2}\delta_{k,m+2}}_{(m+1)(m+2)\delta_{n,m}} \\
&\qquad + \underbrace{\sqrt{(n+1)(n+2)}(2m+1)\sum_k \delta_{n,k-2}\delta_{k,m}}_{\sqrt{m(m-1)}(2m+1)\delta_{n,m-2}} \\
&\qquad + \underbrace{\sqrt{n(n-1)}\sqrt{m(m-1)}\sum_k \delta_{n,k+2}\delta_{k,m-2}}_{m(m-1)\delta_{n,m}} \\
&\qquad + \underbrace{\sqrt{n(n-1)}\sqrt{(m+1)(m+2)}\sum_k \delta_{n,k+2}\delta_{k,m+2}}_{\sqrt{(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)}\delta_{n,m+4}} \\
&\qquad + \underbrace{\sqrt{n(n-1)}(2m+1)\sum_k \delta_{n,k+2}\delta_{k,m}}_{\sqrt{(m+1)(m+2)}(2m+1)\delta_{n,m+2}} \\
&\qquad + \underbrace{(2n+1)\sqrt{m(m-1)}\sum_k \delta_{n,k}\delta_{k,m-2}}_{(2m-3)\sqrt{m(m-1)}\delta_{n,m-2}} \\
&\qquad + \underbrace{(2n+1)\sqrt{(m+1)(m+2)}\sum_k \delta_{n,k}\delta_{k,m+2}}_{(2m+5)\sqrt{(m+1)(m+2)}\delta_{n,m+2}} \\
&\qquad + \underbrace{(2n+1)(2m+1)\sum_k \delta_{n,k}\delta_{k,m}}_{(2m+1)^2\delta_{n,m}} \\
&= \frac{\gamma x_0^4}{4}\Bigg[\sqrt{m(m-1)(m-2)(m-3)}\delta_{n,m-4} + \sqrt{m(m-1)}(4m-2)\delta_{n,m-2} + (6m^2+6m+3)\delta_{n,m}\end{aligned}$$

$$+\sqrt{(m+1)(m+2)}(4m+6)\delta_{n,m+2}+\sqrt{(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)}\delta_{n,m+4}\Big] \tag{9}$$

und somit:

$$V_{n,m}=\frac{\gamma x_0^4}{4}\Big[\sqrt{m(m-1)(m-2)(m-3)}\delta_{n,m-4}+\sqrt{m(m-1)}(4m-2)\delta_{n,m-2}+(6m^2+6m+3)\delta_{n,m}$$
$$+\sqrt{(m+1)(m+2)}(4m+6)\delta_{n,m+2}+\sqrt{(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)}\delta_{n,m+4}\Big] \tag{10}$$

(b) Da die Zustände nicht-entartet sind nutzen wir den folgenden Ausdruck für die Energiekorrektur in führender Ordnung in $\gamma$:

$$E_n^{(1)}=\langle\, n\mid \hat{V}\mid n\rangle = V_{n,n}\overset{(10)}{=}\frac{\gamma x_0^4}{4}\big[6n^2+6n+3\big] \tag{11}$$

Die Korrektur $|n^{(1)}\rangle$ in führender Ordnung in $\gamma$ für die Eigenzustände $|n\rangle$ ist gegeben durch ($E_n=\hbar\omega(n+1/2)$)

$$\begin{aligned}
|n^{(1)}\rangle &= \sum_{m\neq n}\frac{\langle\, m\mid\hat{V}\mid n\rangle}{E_n-E_m}|m\rangle=\sum_{m\neq n}\frac{V_{mn}}{E_n-E_m}|m\rangle\\
&=\sum_{m\neq n}\frac{|n\rangle}{E_n-E_m}\frac{\gamma x_0^4}{4}\Big[\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}\delta_{m,n-4}+\sqrt{n(n-1)}(4n-2)\delta_{m,n-2}\\
&\quad+(6n^2+6n+3)\delta_{m,n}+\sqrt{(n+1)(n+2)}(4n+6)\delta_{m,n+2}+\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}\delta_{m,n+4}\Big]\\
&=\frac{\gamma x_0^4}{4}\Big[\frac{\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}\,|n-4\rangle}{E_n-E_{n-4}}+\frac{\sqrt{n(n-1)}(4n-2)\,|n-2\rangle}{E_n-E_{n-2}}\\
&\quad+\frac{\sqrt{(n+1)(n+2)}(4n+6)\,|n+2\rangle}{E_n-E_{n+2}}+\frac{\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}\,|n+4\rangle}{E_n-E_{n+4}}\Big]\\
&=\underbrace{\frac{\gamma x_0^4}{8\hbar\omega}}_{\frac{\hbar\gamma}{8m^2\omega^3}}\Big[\frac{\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}}{2}|n-4\rangle+\sqrt{n(n-1)}(4n-2)\,|n-2\rangle\\
&\quad-\sqrt{(n+1)(n+2)}(4n+6)\,|n+2\rangle-\frac{\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}}{2}|n+4\rangle\Big]
\end{aligned} \tag{12}$$

(c) Wir suchen die Quantenzahl $n$ für die gilt

$$\begin{aligned}
\Delta E_n=\hbar\omega &= E_n^{(1)}\\
\hbar\omega &= \frac{\gamma x_0^4}{4}\big[6n^2+6n+3\big]\\
\frac{2}{3}\frac{\hbar\omega}{\gamma x_0^4} &= n^2+n+1/2\\
0 &= n^2+n+\Big(\frac{1}{2}-\frac{2}{3}\frac{\hbar\omega}{\gamma x_0^4}\Big)
\end{aligned} \tag{13}$$

Die Lösung dieser Gleichung ist natürlich gerade (nur positive $n$ erlaubt, daher nur + Lösung)

$$n=-\frac{1}{2}+\sqrt{(1/2)^2-\left(\frac{1}{2}-\frac{2}{3}\frac{\hbar\omega}{\gamma x_0^4}\right)}=-\frac{1}{2}+\sqrt{\frac{2}{3}\frac{\hbar\omega}{\gamma x_0^4}-\frac{1}{4}} \tag{14}$$

Für $n \in \mathbb{N}_0$ von dieser Größenordnung ist die Störungstheorie nicht mehr gerechtfertigt, da die Energiekorrektur größer wird als die Energiedifferenzen $\Delta E_n$ zwischen benachbarten ungestörten Zuständen.
Da nun gilt $\frac{\hbar\omega}{\gamma x_0^4} \gg 1$ könnten wir dieses Resultat sogar noch vereinfachen

$$n \approx \sqrt{\frac{2}{3}\frac{\hbar\omega}{\gamma x_0^4}} \tag{15}$$

(d) Die Energiekorrektur in zweiter Ordnung ist gegeben durch:

$$\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= \sum_{m\neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n - E_m} \\
&= \sum_{m\neq n} \underbrace{\frac{1}{E_n - E_m}}_{\frac{1}{(n-m)\hbar\omega}} \frac{\gamma^2 x_0^8}{16}\Big[ n(n-1)(n-2)(n-3)\delta_{m,n-4} + n(n-1)(4n-2)^2\delta_{m,n-2} \\
&\quad + (6n^2+6n+3)^2\delta_{m,n} + (n+1)(n+2)(4n+6)^2\delta_{m,n+2} + (n+1)(n+2)(n+3)(n+4)\delta_{m,n+4}\Big] \\
&= \frac{\gamma^2 x_0^8}{16\hbar\omega}\Big[\frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{4} + \frac{n(n-1)(4n-2)^2}{2} - \frac{(n+1)(n+2)(4n+6)^2}{2} \\
&\qquad - \frac{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}{4}\Big] \\
&= -\underbrace{\frac{\gamma^2 x_0^8}{8\hbar\omega}}_{\frac{\hbar^3\gamma^2}{8m^4\omega^5}}(21 + 59n + 51n^2 + 34n^3)
\end{aligned} \tag{16}$$

## 3. Stark Effekt

(a) Das Skalarpotential für ein homogenes elektrisches Feld $\vec{E} = E\vec{e}_z = -\nabla\phi$ ist natürlich gegeben durch:

$$\phi(\vec{x}) = -E \cdot z \tag{17}$$

sodass der Störterm des elektrischen Feldes im Hamiltonoperator wie folgt aussieht

$$\hat{V} = e\phi = -eE\hat{z} \tag{18}$$

(b) Da der Grundzustand $|1\rangle = |n=1, l=0, m=0\rangle$ des Wasserstoffatoms nichtentartet ist (abgesehen vom Spin up und down), nutzen wir die Formel für die nicht-entartete Störungstheorie

$$E_1^{(1)} = \langle 1 \mid \hat{V} \mid 1 \rangle = -eE \int d^3r\, |\psi_{1,0,0}(\vec{r})|^2 \cdot z \tag{19}$$

Die Grundzustandswellenfunktion des Wasserstoffatoms ist gegeben durch

$$\psi_{1,0,0}(\vec{r}) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} \underbrace{Y_{0,0}(\theta,\phi)}_{=\sqrt{1/4\pi}} \tag{20}$$

sodass

$$\begin{aligned}
E_1^{(1)} &= -\frac{eE}{\pi a_0^3}\int d^3r e^{-2r/a_0} \cdot z \\
&= -\frac{eE}{\pi a_0^3}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d\cos\theta \int_0^\infty drr^2 \cdot e^{-2r/a_0} \cdot r\cos\theta \\
&= -\frac{2eE}{a_0^3}\int_0^\infty drr^3 \cdot e^{-2r/a_0} \underbrace{\int_{-1}^{1} d\cos\cdot\cos\theta}_{=0} = 0
\end{aligned} \tag{21}$$

(c) Die Matrixelemente lassen sich berechnen zu

$$\langle 1,0,0 \mid \hat{V} \mid n,l,m \rangle = \int d^3r \psi^*_{1,0,0}(\vec{r})(-eEz)\psi_{n,l,m}(\vec{r}) \tag{22}$$

Wir können nun umschreiben

$$\psi_{1,0,0}(\vec{r}) = u_{1,0}(r)Y_{0,0}(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}u_{1,0}(r) \tag{23}$$

$$\psi_{n,l,m}(\vec{r}) = u_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\phi) \tag{24}$$

$$z = r\cos\theta = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{1,0}(\theta,\phi) \tag{25}$$

und nutzen die Orthogonalität der Kugelflächenfunktionen:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta Y^*_{l,m}(\theta,\phi)Y_{l',m'}(\theta,\phi) = \delta_{l,l'}\delta_{n,n'} \tag{26}$$

um zu berechnen

$$\begin{aligned}
\langle 1,0,0 \mid \hat{V} \mid n,l,m \rangle &= \int d^3r \psi^*_{1,0,0}(\vec{r})(-eEz)\psi_{n,l,m}(\vec{r}) \\
&= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{\infty} dr\, r^2 \Big(\frac{1}{\sqrt{4\pi}}u^*_{1,0}(r)\Big)\Big(-eEr\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y^*_{1,0}(\theta,\phi)\Big)\cdot \\
&\qquad \Big(u_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\phi)\Big) \\
&= \frac{-eE}{\sqrt{3}} \int_0^{\infty} dr\, r^3 u^*_{1,0}(r)u_{n,l}(r) \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta Y^*_{1,0}(\theta,\phi)Y_{l,m}(\theta,\phi)}_{=\delta_{l,1}\delta_{m,0}} \\
&= \delta_{l,1}\delta_{m,0}\frac{-eE}{\sqrt{3}} \int_0^{\infty} dr\, r^3 u^*_{1,0}(r)u_{n,l}(r)
\end{aligned} \tag{27}$$

(d) Wir bekommen für die Grundzustandsenergiekorrektur zweiter Ordnung

$$\begin{aligned}
E_1^{(2)} &= \sum_{n=2}^{\infty}\sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{l} \frac{\left|\langle 1,0,0 \mid \hat{V} \mid n,l,m \rangle\right|}{E_1 - E_n} \approx \sum_{l=0}^{1}\sum_{m=-l}^{l} \frac{\left|\langle 1,0,0 \mid \hat{V} \mid 2,l,m \rangle\right|}{E_1 - E_2} \\
&= -\frac{4}{3R_0}\sum_{l=0}^{1}\sum_{m=-l}^{l} \underbrace{\left|\langle 1,0,0 \mid \hat{V} \mid 2,l,m \rangle\right|^2}_{\sim\delta_{l,1}\delta_{m,0}} = -\frac{4}{3R_0}\left|\langle 1,0,0 \mid \hat{V} \mid 2,1,0 \rangle\right|^2
\end{aligned} \tag{28}$$

wobei wir genähert haben, dass nur die Korrekturen durch die $n = 2$ Zustände relevant sind und $R_0 = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = \frac{e^2}{2a_0}$ die Rydberg-Energie mit dem Bohrradius $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ ist. Wir benötigen nun noch

$$u_{1,0}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}}e^{-r/a_0} \tag{29}$$

$$u_{2,1}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}} \tag{30}$$

und berechnen nun

$$\begin{aligned}
\langle 1,0,0 \mid \hat{V} \mid 2,1, \rangle &\overset{(27)}{=} \frac{-eE}{\sqrt{3}} \int_0^{\infty} dr\, r^3 u^*_{1,0}(r)u_{2,1}(r) = \frac{-eE}{\sqrt{2}\,3a_0^4}\int_0^{\infty} dr\, r^4 e^{-\frac{3r}{2a_0}} \\
&= \frac{-eEa_0 2^5}{\sqrt{2}\,3^6}\underbrace{\int_0^{\infty} dx\, x^4 e^{-x}}_{4!} = -\frac{2^7\sqrt{2}}{3^5}eEa_0
\end{aligned} \tag{31}$$

Damit bekommen wir nun für die Grundzustandsenergiekorrektur zweiter Ordnung

$$E_1^{(2)} \approx -\frac{4}{3R_0}\left|\langle 1,0,0 \mid \hat{V} \mid 2,1,0 \rangle\right|^2 = -\frac{4}{3R_0}\frac{2^{15}}{3^{10}}e^2a_0^2E^2$$

$$= -\frac{2^{17}}{3^{11}} \frac{e^2 a_0^2}{\left(\frac{e^2}{2a_0}\right)} E^2 = -\frac{2^{18}}{3^{11}} a_0^3 E^2 \qquad (32)$$

Die Änderung der Grundzustandsenergie durch das elektrische Feld ist proportional zu $E^2$. Diesen Effekt nennt man quadratischen *Stark-Effekt*. Der lineare Stark-Effekt tritt bei entarteten Energieniveaus auf(z.B. $n = 2$), siehe hierzu das Vorlesungsscript.