Theoretische Physik III

SS 2013 **20.6.2013**
Blatt XI **Fälligkeitsdatum 04.7.2013**

Prof. Dr. Wilhelm-Mauch http://qsolid.uni-saarland.de/?Lehre:TP_III

Übung 1 *Zeeman Effekt*

Wir haben schon das Verhalten eines Elektrons beobachtet, wenn es einem elektrischen oder magnetischen Feld ausgesetzt ist. Jetzt betrachten wir den Fall dass beide Felder gleichzeitig auf das Elektron wirken. Betrachte den Hamiltonoperator des spinlosen Elektrons eines Wasserstoffatoms mit dem skalaren Potenzial $V(\mathbf{r})$ und dem Vektorpotenzial $\mathbf{A}(\mathbf{r})$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_e}\left[\hat{\mathbf{p}} - q\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})\right]^2 + \hat{V}(\mathbf{r})\,. \tag{1}$$

a) Betrachte ein homogenes Feld $\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$ in die z-Richtung. Zeige, dass $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2$ gilt, mit

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + \hat{V}(\mathbf{r})\,, \tag{2}$$

$$\hat{H}_1 = -\frac{\mu_B}{\hbar}\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{B}} \quad \text{und} \tag{3}$$

$$\hat{H}_2 = \frac{q^2\hat{\mathbf{B}}^2}{8m_e}\hat{\mathbf{r}}_\perp^2\,. \tag{4}$$

$\hat{\mathbf{L}}$ ist der Drehimpulse des Elektrons, $\mu_B = \frac{q\hbar}{2m_e}$ das Bohrsche Magneton und $\hat{\mathbf{r}}_\perp^2 = \hat{\mathbf{r}}^2 - (\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{B}})^2/B^2$. *(1 Punkt)*

b) Im Labor erzeugte Magnetfelder sind selten größer als 10^5 G und die Matrixelemente von $\hat{\mathbf{r}}_\perp^2$ sind von der gleichen Größenordnung wie a_0^2 (Bohrscher Radius). Zeige, dass für den Unterschied in der Energien wegen $\hat{H}_i$ $\Delta E_2 \ll \Delta E_1 \ll \Delta E_0$ gilt. *(1 Punkt)*

c) Zeige, dass $\hat{H}_1$ (paramagnetischer Ausdruck) und $\hat{H}_2$ (diamagnetischer Ausdruck) die Kopplungenergien $-\hat{\mathbf{M}}_i\cdot\hat{\mathbf{B}}$ des Magnetfelds $\hat{\mathbf{B}}$ mit dem magnetischen Moment $\hat{\mathbf{M}}_1$ des Elektrons in seinen Orbit und des Magnetfelds mit dem magnetischen Moment $\hat{\mathbf{M}}_2$ des Atoms darstellen. *(1 Punkt)*

d) Da nun jeder Ausdruck von $\hat{H}$ verstanden wurde, kann der Effekt des homogenen Feldes $\hat{\mathbf{B}}$ auf die Spektrallinie des Wasserstoffatoms ($\lambda \simeq 1200$ Å) betrachtet werden. Diese Linie bezieht sich auf den Übergang zwischen dem Grundzustand 1s ($n = 1, l = m = 0$) und dem angeregten Zustand 2p ($n = 2, l = 1, m = -1, 0, 1$). Vernachlässige den diamagnetischen Ausdruck und zeige, dass die gemeinsamen Eigenzustände $|\phi_{n,l,m}\rangle$ von $\hat{H}_0$, $\hat{\mathbf{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ auch Eigenvektoren von $\hat{H}_0 + \hat{H}_1$ sind und berechne die veränderten Eigenenergien. *(1 Punkt)*

e) Sei

$$\chi = \int_0^\infty R_{2,1}(r) R_{1,0}(r) r^3 \mathrm{d}r \,.$$

Bestimme die Zeitentwicklung des Dipoloperators $\hat{\mathbf{D}} = q\hat{\mathbf{R}}$

$$\langle \hat{\mathbf{D}} \rangle_m(t) = \langle \psi_m(t) | \hat{\mathbf{D}} | \psi_m(t) \rangle \tag{5}$$

für den Anfangszustand $|\psi_m(t=0)\rangle = \cos\alpha\, |\phi_{1,0,0}\rangle + \sin\alpha\, |\phi_{2,1,m}\rangle$, wobei $m = -1, 0, -1$.
Hinweis: drücke x, y und z durch Kugelflächenfunktionen aus. *(2 Punkte)*

Übung 2 *Laguerre-Polynome und Laguerre-Funktionen*

Diese Übung zeigt wie man den Radialteil der Wellenfunktion des Wasserstoffatoms erhält.

a) In kugelsymmetrischen Systemen können die Energieeigenzustände durch die Produktform $\psi(\mathbf{r}) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi)$ ausgedrückt werden. Für den Radialteil $R(r)$ ergibt die Schrödingergleichung

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) R(r) = \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} [V(r) - E] + l(l+1) \,. \tag{6}$$

μ ist die Masse, l die Nebenquantenzahl und r ist die Radialkoordinate. Zeige, dass für das Wasserstoffatom mit dem Potenzial $V(r) = -\frac{e^2}{r}$, Gleichung (6) gleichbedeutend ist mit

$$\frac{d^2 y(r)}{dr^2} + \left[\frac{2\mu e^2}{r\hbar^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y(r) = 0 \,, \tag{7}$$

wobei $y(r) = rR(r)$. *(1 Punkt)*

b) Zeige, dass Gleichung (7) gleichbedeutend ist mit

$$\frac{d^2 y_j^k(x)}{dx^2} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{2j+k+1}{2x} - \frac{k^2-1}{4x^2} \right) y_j^k(x) = 0 \,. \tag{8}$$

Dabei wurde die Substitutionen $x = r\epsilon$, $\epsilon^2/4 = -2\mu E/\hbar^2$, $k^2 - 1 = 4l(l+1)$ und $2\mu e^2/(\hbar^2 \epsilon) = (2j+k+1)/2$ durchgeführt. y wird nun mit j und k indiziert. Diese Gleichung ist einfacher zu lösen als Gleichung (6). *(1 Punkt)*

c) Laguerre-Polynome können aus Rodrigues' Formel (für Laguerre Polynome)

$$L_j(x) = e^x \frac{d^j}{dx^j} (e^{-x} x^j) \tag{9}$$

entwickelt werden. Zeige, dass die Polynome $L_j(x)$, gegeben durch (9), die Laguerre-Gleichung

$$x \frac{d^2 L_j(x)}{dx^2} + (1-x) \frac{d L_j(x)}{dx} + j L_j(x) = 0 \tag{10}$$

erfüllen.
Hinweis: durch die Ableitung von $g_j \equiv e^{-x}x^j$ kann gezeigt werden, dass

$$x\frac{dg_j}{dx} = (j-x)g_j \,. \tag{11}$$

Leite Gleichung (11) j+1 mal ab und sei vorsichtig bei Verwendung der Produktregel (Leibnizregel). Mit der Subsitution $L_j = e^x \frac{d^j g_j}{dx^j}$ in Gleichung (10) können die Ausdrücke umgeordnet werden um die Äquivalenz der beiden Gleichungen zu zeigen. (*2 Punkte*)

d) Die dazugehörigen Laguerre-Polynome können mit Hilfe der Laguerre-Polynome [ausgedrückt durch Gleichung (9)]durch eine Erzeugendefunktion berechnet werden

$$L_j^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_{j+k}(x) \,. \tag{12}$$

Zeige, dass die Polynome $L_j^k(x)$ die Laguerre-Gleichung

$$x\frac{d^2L_j^k(x)}{dx^2} + (1-x+k)\frac{dL_j^k(x)}{dx} + jL_j^k(x) = 0 \tag{13}$$

erfüllen.
Hinweis: Betrachte Gl. (10) mit $j \to j+k$ und leite k-mal ab. (*1 Punkt*)

e) Zeige, dass

$$y_j^k(x) \equiv e^{-x/2}x^{(k+1)/2}L_j^k(x), \tag{14}$$

manchmal auch als zugehörige Laguerre-Funktion bezeichnet, Gl. (8) erfüllt.
Hinweis: substituiere Gl. (14) in Gl. (8), berechne die Ableitung und vereinfache das Ergebnis. Dies liefert die zugehörige Laguerre-Gleichung [Eq. (13)]. Aus d) ist bekannt, dass L_j^k Gl. (13) erfüllt. (*2 Punkte*)

f) In Bezug auf die ursprünglichen Variablen aus a) gilt

$$x = \frac{2r}{na_0}, \quad \frac{k+1}{2} = l+1, \quad k = 2l+1, \quad j = n-l-1, \quad R(r) = \frac{y(r)}{r}\,, \tag{15}$$

wobei $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = 0.529 \times 10^{-10}$ der Bohrsche Radius ist. Unter Verwendung von Gl. (14) und Multiplikation mit einem Normalizierungsfaktor (dessen Bestimmung auch die Berücksichtigung von $Y_l^m(\theta,\phi)$ erfordert) ergibt der Radialteil der Wellenfunktion

$$R_{n,l}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-r/na_0} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \,. \tag{16}$$

Berechne den Radialteil der Wellenfunktionen $R_{1,0}(r)$, $R_{2,0}(r)$, $R_{2,1}(r)$, und $R_{3,0}(r)$.
Hinweis: Benutze, Gl. (9) und (12). (*1 Punkt*)