
13. ÜBUNG ZUR QUANTENMECHANIK

Besprechung der Präsenzaufgaben: **Fr., 10.7.2015**

Abgabe der schriftlichen Aufgaben: **Di., 14.7.2015 - INF 227 HS1, 11:00-12:00**

Die Klausur findet am Samstag, 25.07.2015, ab 9:30 Uhr *s.t.* in HS1 und HS2 in INF 227 (KIP) sowie HS1 und HS2 in INF 308 (Hörsaalgebäude der Physik) statt. Bitte finden Sie sich rechtzeitig in folgenden Hörsälen entsprechend Ihren Nachnamen ein:

Nachname	Hörsaal
A–J	HS1 INF 308
K–L	HS2 INF 227
M–R	HS2 INF 308
S–Z	HS1 INF 227

Es werden Ihnen zur Bearbeitung der Klausur 180 Minuten zur Verfügung stehen. Bitte bringen Sie einen Lichtbildausweis, Schreibgerät (blau oder schwarz, kein Bleistift) und unbeschriebenes Papier mit. Es sind keine weiteren Hilfsmittel erlaubt.

Zur Klausur zugelassen ist, wer in den Übungen mindestens 60% der Punkte, d. h. 144 Punkte oder mehr, erreicht hat.

Die Prüfung gilt im Moment der Teilnahme an der Klausur als angetreten. Zum Bestehen des Moduls sind 30% der Punkte in der Klausur erforderlich.

An der Nachklausur (voraussichtlich am 24.09.2015) kann nur teilnehmen, wer bereits an der ersten Klausur teilgenommen und sie nicht bestanden hat, oder einen triftigen Grund für die Nichtteilnahme nachweisen kann.

P 54 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

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

- (a) Zeigen Sie, dass der Zeitumkehroperator $\mathcal{T} : \psi \rightarrow \psi'$ 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 55 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 $\vec{k}_\omega = \vec{n}\omega/c$

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

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

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

hat, wobei $\vec{d} = e \vec{x}$ 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 des sichtbaren Lichts gültig ist.

Hinweis: Beachten Sie, dass $[\vec{d}, \mathbf{H}_0] = -ie\hbar\vec{P}/m$ (warum?).

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

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

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 $z = x_3$):

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

- (e) Berechnen Sie W_{fi} für den $1s \rightarrow 2p$ - und für den $1s \rightarrow 3p$ -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:

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

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

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

Außerdem gilt

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

S 56 Summenregel von Thomas-Reiche-Kuhn

(optional, + 5 Punkte)

Die sog. Oszillatorstärke ist mit den Bezeichnungen aus Aufg. 55 definiert als

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

Sie beschreibt die Absorptionswahrscheinlichkeit eines Photons am Wasserstoffatom.

(a) Zeigen Sie

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

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

S 57 Helium-Atom

(optional, + 6 Punkte)

Der Hamiltonoperator des Helium-Atoms ist

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

wobei m die Elektronenmasse und $-e_0$ die Ladung des Elektrons sind. Die Indizes in Klammern beziehen sich auf die beiden Elektronen, $r^{(1)} = |\vec{x}^{(1)}|$, $r^{(2)} = |\vec{x}^{(2)}|$. 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 Coulomb-Problems 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

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

worin

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

die normierte Grundzustandswellenfunktion für das Coulomb-Problem 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:

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

Bemerkung: Der mit dem Ritzschen Variationsverfahren gewonnene Wert für die Grundzustandsenergie liegt um 2.7 eV näher am experimentell gemessenen Wert ($E_0 = -78.8$ 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/qm15.html>