



Grundvorlesung Theoretische Chemie – Quantenmechanik I

Übungsblatt Nr. 7, 28.01.2014

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in dem Seminar am 06.02.2014

Aufgabe 18: Gestörter eindimensionaler Harmonischer Oszillator

Ein Harmonischer Oszillator in einer Dimension wird durch ein Potential

$$\lambda H_1 = bx$$

gestört, wobei b eine Konstante ist.

- Berechnen Sie die Energieverschiebung in erster nicht-verschwindender Ordnung.
- Lösen Sie das $H_0 + V$ Problem exakt. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der Störungsrechnung aus (a).

Hinweis: Sie können ohne Beweis annehmen, dass

$$\langle u_i | x | u_j \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\sqrt{j+1} \delta_{i,j+1} + \sqrt{j} \delta_{i,j-1} \right).$$

Zur exakten Lösung bei b) sollten Sie eine quadratische Ergänzung beim Potentialterm im Hamiltonoperator anwenden

Aufgabe 19: Gestörter zweidimensionaler Harmonischer Oszillator

Betrachten Sie einen isotropen harmonischen Oszillator in zwei Dimensionen beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2).$$

- Bestimmen Sie die Eigenenergien der drei niedrigsten Zustände. Gibt es Entartungen?
- Nun sei eine Störung

$$V = \lambda m\omega^2 xy$$

gegeben, wobei λ eine dimensionslose reelle Zahl sei, die viel kleiner als Eins ist. Bestimmen Sie die Energieeigenzustände in null-ter Ordnung und die entsprechenden Energien in erster Ordnung für jeden der drei niedrigsten Zustände.

- Lösen Sie das $H_0 + V$ Problem exakt. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der Störungsrechnung aus (b).

Hinweis: Die exakte Lösung ist am einfachsten zu erhalten, wenn Sie die Koordinaten in der xy -Ebene um 45° drehen.

bitte wenden!

Zusatzaufgabe 20: Anomaler Zeeman-Effekt

Als Zeeman-Effekt bezeichnet man in der Atomphysik das mehrfache Aufspalten einer Spektrallinie, wenn an die emittierende Materie ein externes Magnetfeld angelegt wird. Betrachten Sie daher ein Valenzelektron in einem Wasserstoff-artigen Atom in einem gleichförmigen externen Magnetfeld, dass durch einen Hamiltonoperator $H = H_0 + H_1$ beschrieben wird, wobei

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) + \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \mathbf{L}\mathbf{S}$$

und

$$H_1 = -(\mu_L + \mu_S) \mathbf{B} = -\frac{e|\mathbf{B}|}{2m^2c^2} (L_z + 2S_z),$$

d.h. $\mu_L = \frac{e}{2mc} \mathbf{L}$, $\mu_S = \frac{e}{mc} \mathbf{S}$ und $\mathbf{B} = |\mathbf{B}| \mathbf{e}_z$. Die Eigenzustände von H_0 können mit Hilfe der Eigenwerte von J^2 , J_z , L^2 und S^2 charakterisiert werden, wobei $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ gilt. Berechnen Sie in erster Ordnung die Energieverschiebung verursacht durch H_1 für s und p Zustände für Hauptquantenzahlen $n \geq 2$ (d.h. für Schalen, in den s und p Zustände vorkommen, und skizzieren Sie diese als Funktion des magnetischen Feldes.

Hinweis: Entwickeln Sie die Eigenzustände $|j, m_j, l, s\rangle$ in der Basis der Eigenzustände $|l, m_l, s, m_s\rangle$ (dazu ist der Ausdruck (4.149) in der Vorlesung hilfreich). Die Eigenenergien von H_0 müssen (und können) nicht explizit berechnet werden. Nehmen Sie ohne Beweis an, dass durch die Feinstruktur und die Spin-Bahn Kopplung die Zustände bereits aufgespalten werden, wodurch die s und p Zustände in der energetischen Reihenfolge ${}^2S_{1/2}$, ${}^2P_{1/2}$ und ${}^2P_{3/2}$ angeordnet werden (vergl. Kapitel 5.2.2).