



**Übung 1.** [Effekt eines ausgedehnten Atomkerns auf die Energieniveaus des H-Atoms]

Sei das Proton durch eine gleichmässig geladene dünne Kugelschale mit Radius  $b$  beschrieben.

- a) Zeige, dass in erster Ordnung Störungstheorie die relative Änderung der Grundzustandsenergie im Wasserstoffatom in der Näherung  $b/a_0 \ll 1$  gegeben ist durch

$$\frac{E^{(1)}}{E^{(0)}} = -\frac{4b^2}{3a_0^2}, \quad (1)$$

wobei  $a_0$  der Bohr-Radius ist.

Hinweis: der Radius des Protons ist etwa  $b \approx 10^{-15}$  m.

- b) Warum ist die relative Änderung der Grundzustandsenergie viel grösser, wenn man ein  $\mu^-$  betrachtet, das einen Bleikern umkreist?

**Lösung.**

- a) Für einen punktförmigen Kern gilt das Coulomb-Potential  $V^{(0)}(r) = -\frac{e^2}{r}$ . Für eine dünne, gleichmässig geladene Kugel gilt stattdessen

$$V^{(1)} = \begin{cases} -\frac{e^2}{r} & r > b \\ -\frac{e^2}{b} & r < b \end{cases} \quad (L.1)$$

Daher ist das Störpotential gegeben durch

$$V(r) = V^{(1)} - V^{(0)} = \begin{cases} 0 & r > b \\ e^2 \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{b}\right) & r < b \end{cases} \quad (L.2)$$

Die Korrektur erster Ordnung des Grundzustandes ist in der Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie durch den Erwartungswert von  $V(r)$  im Grundzustand  $|nlm\rangle = |100\rangle$  gegeben:

$$E^{(1)} = \int d^3r \Psi_{nlm}^* V(r) \Psi_{nlm} \quad (L.3)$$

Da die Störung nicht von  $\ell$  oder  $m$  abhängt, können wir nur den radialen Anteil betrachten (die Kugelflächenfunktionen integrieren sich auf 1). Wir verwenden deshalb die Wellenfunktion  $R_{1s}(r) = \sqrt{\frac{4Z}{a_0^3}} \exp(-r/a_0)$ , wobei  $a_0$  der Bohr-Radius ist und die Kernladungszahl  $Z = 1$ . Wir erhalten somit für die Korrektur zur Energie

$$E^{(1)} = \int dr r^2 R_{1s}^* V(r) R_{1s} \quad (L.4)$$

$$= \frac{4e^2}{a_0^3} \int_0^b dr r^2 \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{b}\right) \exp(-2r/a_0) \quad (L.5)$$

$$= \frac{4b^2 e^2}{a_0^3} \int_0^1 dr r^2 \left(\frac{1}{r} - 1\right) \exp(-2\frac{b}{a_0} r) \quad (L.6)$$

wobei wir  $r \rightarrow br$  im letzten Schritt substituiert haben. Da  $a_0 \approx 10^{-10}$  m aber  $b \approx 10^{-15}$  m, gilt  $\frac{b}{a_0} \approx 10^{-5} \ll 1$  und wir können die Exponentialfunktion vernachlässigen. Das Integral ergibt dann

$$E^{(1)} \approx \frac{4b^2 e^2}{a_0^3} \int_0^1 dr (r - r^2) = \frac{2e^2}{3a_0^3} b^2. \quad (\text{L.7})$$

Das Verhältnis zwischen den Energien ist mit  $E^{(0)} = -\frac{e^2}{2a_0}$  also

$$\frac{E^{(1)}}{E^{(0)}} = -\frac{4b^2}{3a_0^2} \approx 10^{-10} \quad (\text{L.8})$$

- b) Aus der Bohr-Theorie wissen wir, dass wenn ein Teilchen der Masse  $m$  um einen Kern der Ladung  $Ze$  umkreist, der Radius der Bahn proportional zu  $\frac{1}{Zm}$  ist. Für das  $\mu$ -Atom muss  $a_0$  durch  $a = \frac{a_0 m_e}{Z m_\mu}$  ersetzt werden. Weiterhin variiert der Radius eines Nukleons wie  $A^{\frac{1}{3}}$ , wobei  $A$  die Massezahl des Nukleons ist. Z.B. ist  $A = 208$  für Blei. Mit diesen Zahlen ist  $\frac{E^{(1)}}{E^{(0)}} \approx 1$ , d.h. die Störungstheorie ist nicht mehr gültig. Der Effekt der Störung sollte von der gleichen Größenordnung wie  $E^{(0)}$  sein, was experimentell durch den  $K_\alpha$ -Übergang vom  $\mu$ -Blei-Atom bestätigt wird.

## Übung 2. [Variationsverfahren]

Wir wollen den Grundzustand des eindimensionalen Potentialtopfs mit unendlich hohen Wänden,

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a, \\ \infty, & |x| \geq a, \end{cases} \quad (2)$$

abschätzen. Die exakte Lösung ist gegeben durch,

$$\phi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right), \quad (3)$$

$$E_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \left(\frac{\pi^2}{4a^2}\right). \quad (4)$$

- (a) Offensichtlich muss die Wellenfunktion bei  $x = \pm a$  verschwinden. Des Weiteren kann die Wellenfunktion des Grundzustands keine weiteren Nullstellen haben. Ein simpler analytischer Ansatz (ohne Variationsparameter), der beides erfüllt, ist eine Parabel durch  $x = \pm a$ ,

$$\phi(x) = a^2 - x^2. \quad (5)$$

Berechne das Energiefunktional für diesen Ansatz.

- (b) Wir wählen nun einen anspruchsvolleren Ansatz mit einem Variationsparameter  $\lambda$ ,

$$\phi(x) = |a|^\lambda - |x|^\lambda. \quad (6)$$

Schätze mit dem Ritz'schen Variationsverfahren die Grundzustandsenergie für diesen Ansatz ab.

## Lösung.

(a) Wir berechnen das Energiefunktional,

$$\langle H \rangle_\phi = \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \quad (\text{L.9})$$

$$= \frac{\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right) \int_{-a}^a dx (a^2 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} (a^2 - x^2)}{\int_{-a}^a dx (a^2 - x^2)^2} \quad (\text{L.10})$$

$$= \left(\frac{10}{\pi^2}\right) \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{8a^2 m}\right) \quad (\text{L.11})$$

$$\approx 1.0132 E_0. \quad (\text{L.12})$$

Der einfache Ansatz liefert somit eine Grundzustandsenergie, die nur 1.3% von der exakten abweicht.

(b) Wir berechnen wiederum das Energiefunktional und finden

$$\langle H \rangle_\phi = \left[ \frac{(\lambda + 1)(2\lambda + 1)}{(2\lambda - 1)} \right] \left( \frac{\hbar^2}{4ma^2} \right). \quad (\text{L.13})$$

Das Energiefunktional hat ein Minimum bei

$$\lambda = \frac{1 + \sqrt{6}}{2} \approx 1.72, \quad (\text{L.14})$$

und nimmt dort den Wert

$$\langle H \rangle_{\phi, \min} = \left( \frac{5 + 2\sqrt{6}}{\pi^2} \right) E_0 \approx 1.00298 E_0 \quad (\text{L.15})$$

an. Die Abweichung zur exakten Grundzustandsenergie beträgt nur noch 0.3%.

### Übung 3. [Positronium im magnetischen Feld]

Betrachten Sie den Grundzustand ( $l = 0$ ) des Positroniums, ein exotisches Atom, das aus einem Positron und einem Elektron besteht. Wenn das Positronium sich in einem magnetischen Feld  $\vec{B}$  befindet, lässt sich der Hamiltonoperator als  $H = H_0 + H_S + H_B$  schreiben, wobei  $H_0$  der Bohr'sche Hamiltonoperator ist,  $H_S = A \vec{s}_p \cdot \vec{s}_e$  die Wechselwirkung zwischen den Spins der beiden Teilchen beschreibt und  $H_B = -(\vec{\mu}_p + \vec{\mu}_e) \cdot \vec{B}$  die potentielle Energie durch die Wechselwirkung mit dem äusseren Feld ist.

- Welche Darstellung der Eigenzustände von Spins und Drehimpuls ist für den Fall  $\vec{B} = 0$  am besten geeignet? Bestimmen Sie die Energieaufspaltungen durch  $H_S$ .
- Betrachten Sie nun den Fall eines schwachen magnetischen Feldes ( $H_B \ll H_S$ ). Zeigen Sie, dass die Energieniveaus von  $H_0 + H_S$  in erster Ordnung von der Störung  $H_B$  nicht verändert werden. Berechnen Sie die Zustandskorrekturen erster Ordnung, um die Energiekorrekturen zweiter Ordnung zu bestimmen.
- Wenn das äussere Feld ausreichend stark ist, kann  $H_S$  ignoriert werden, sodass  $H = H_0 + H_B$ . Welche Darstellung der Zustände eignet sich in diesem Fall am besten? Bestimmen Sie die Energieaufspaltungen durch  $H_B$ .

## Lösung.

- (a) Wir benutzen die Eigenzustände  $|00SS_z\rangle$ , wobei die beiden ersten Quantenzahlen für  $l$  und  $m$  stehen.  $H_S$  lässt sich wie folgt umschreiben:

$$H_S = A\vec{s}_p \cdot \vec{s}_e = \frac{A}{2}(\vec{S}^2 - \vec{s}_e^2 - \vec{s}_p^2) \quad (\text{L.16})$$

Deshalb:

$$H_B|00SS_z\rangle = \frac{A\hbar^2}{2} \left( S(S+1) - \frac{3}{2} \right) |00SS_z\rangle \quad (\text{L.17})$$

- 1) Energieeigenwert  $E_0$  des Singulett-Zustands  $|0000\rangle$ :

$$(H_0 + H_S)|0000\rangle = \left( \mathcal{E}_0 - \frac{3}{4}A\hbar^2 \right) |0000\rangle \quad (\text{L.18})$$

- 2) Energieeigenwert  $E_1$  der Triplett-Zustände  $|001S_z\rangle$ :

$$(H_0 + H_S)|001S_z\rangle = \left( \mathcal{E}_0 + \frac{1}{4}A\hbar^2 \right) |001S_z\rangle \quad (\text{L.19})$$

- (b) Wenn  $\vec{B} = B\hat{u}_z$ , lässt sich  $H_B$  wie folgt umschreiben:

$$H_B = -(\vec{\mu}_p + \vec{\mu}_e) \cdot \vec{B} = \frac{eB}{mc}(s_{ez} - s_{pz}) \quad (\text{L.20})$$

Deshalb:

$$H_B|0011\rangle = H_B|00\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle = 0 \quad (\text{L.21})$$

$$H_B|001-1\rangle = H_B|00-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\rangle = 0$$

$$\begin{aligned} H_B|0010\rangle &= H_B \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ |00\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\rangle + |00-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle \right] \\ &= \frac{eB\hbar}{mc} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ |00\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\rangle - |00-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle \right] = \frac{eB\hbar}{mc} |0000\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_B|0000\rangle &= H_B \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ |00\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle - |00-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle \right] \\ &= \frac{eB\hbar}{mc} \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ |00\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\rangle + |00-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle \right] = \frac{eB\hbar}{mc} |0010\rangle \end{aligned} \quad (\text{L.22})$$

- 1) Singulett-Zustand  $|0000\rangle$ :

Der ungestörte Energieeigenwert ist

$$E_0^{(0)} = E_0 = \mathcal{E}_0 - \frac{3}{4}A\hbar^2. \quad (\text{L.23})$$

Die Energiekorrektur erster Ordnung ist

$$E_0^{(1)} = \langle 0000|H_B|0000\rangle = 0. \quad (\text{L.24})$$

Die Zustandskorrektur erster Ordnung ist

$$|0000\rangle_B = |0000\rangle + \frac{\langle 0000|H_B|0010\rangle}{E_0 - E_1} |0010\rangle = |0000\rangle - \frac{eB}{mc} \frac{1}{A\hbar} |0010\rangle. \quad (\text{L.25})$$

Die Energiekorrektur zweiter Ordnung ist

$$E_0^{(2)} = \langle 0000|H_B|0000\rangle_B = - \left( \frac{eB}{mc} \right)^2 \frac{1}{A}. \quad (\text{L.26})$$

2) Triplett-Zustände  $|001S_z\rangle$ :

Der ungestörte Energieeigenwert ist

$$E_1^{(0)} = E_1 = \mathcal{E}_0 + \frac{1}{4}A\hbar^2. \quad (\text{L.27})$$

Für die Energiekorrektur erster Ordnung finden wir

$$\langle 001S'_z | H_B | 001S_z \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad E_1^{(1)} = 0. \quad (\text{L.28})$$

Die Zustandskorrekturen erster Ordnung sind

$$\begin{aligned} |0011\rangle_B &= |0011\rangle, \\ |001-1\rangle_B &= |001-1\rangle, \\ |0010\rangle_B &= |0000\rangle + \frac{\langle 0010 | H_B | 0000 \rangle}{E_1 - E_0} |0000\rangle = |0010\rangle + \frac{eB}{mc} \frac{1}{A\hbar} |0000\rangle. \end{aligned} \quad (\text{L.29})$$

Die entsprechenden Energiekorrekturen zweiter Ordnung sind

$$\begin{aligned} E_1^{(2)} &= 0 \quad \text{for } S_z = \pm 1, \\ E_1^{(2)} &= \langle 0010 | H_B | 0010 \rangle_B = + \left( \frac{eB}{mc} \right)^2 \frac{1}{A} \quad \text{for } S_z = 0. \end{aligned} \quad (\text{L.30})$$

(c) Wir benutzen die Eigenzustände  $|00s_{ez}s_{pz}\rangle$ . Für  $B = 0$  ist der Grundzustand mit Energie  $\mathcal{E}_0$  vierfach entartet.

Nun berechnen wir

$$\begin{aligned} H_B |00 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle &= \frac{eB\hbar}{mc} \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right) |00 \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle = 0, \\ H_B |00 - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle &= -\frac{eB\hbar}{mc} \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right) |00 - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle = 0, \\ H_B |00 \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle &= \frac{eB\hbar}{mc} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) |00 \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle = \frac{eB\hbar}{mc} |00 \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle, \\ H_B |00 - \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle &= -\frac{eB\hbar}{mc} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) |00 - \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle = -\frac{eB\hbar}{mc} |00 - \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (\text{L.31})$$

Deshalb:

$$\begin{aligned} E_0 &= \mathcal{E}_0, & \text{for } s_{ez} = s_{pz} = \pm \frac{1}{2} \\ E_+ &= \mathcal{E}_0 + \frac{eB\hbar}{mc}, & \text{for } s_{ez} = \frac{1}{2}, s_{pz} = -\frac{1}{2} \\ E_- &= \mathcal{E}_0 - \frac{eB\hbar}{mc}, & \text{for } s_{ez} = -\frac{1}{2}, s_{pz} = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (\text{L.32})$$