

Aufgabe 14.1 Harmonischer Oszillator im Kraftfeld
(*Störungstheorie, nicht entarteter Fall*)

Berechne in zweiter Ordnung Störungstheorie die Zustände und Energien eines harmonischen Oszillators im Kraftfeld. Das Problem wird definiert durch den Hamiltonian

$$H = H_0 + H' \quad (1)$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \quad (2)$$

$$H' = -Fq. \quad (3)$$

Stelle sicher, dass der erhaltene Zustand bis zur zweiten Ordnung normiert ist und vergleiche ihn mit dem exakten Resultat. Entwickle hierzu das exakte Ergebnis als Potenzreihe in F .

Aufgabe 14.2 Stark-Effekt für Energieniveaus mit $n = 2$ im Wasserstoffatom
(*Störungstheorie, entarteter Fall*)

Ein Wasserstoffatom wird einem statischen elektrischen Feld ausgesetzt. Der durch das elektrische Feld hervorgerufene Beitrag zum Hamiltonian ist gegeben durch

$$H' = -e \mathbf{E} \cdot \mathbf{r}. \quad (4)$$

- Berechne das durch das Feld induzierte Dipolmoment direkt aus der Wellenfunktion. Das Dipolmoment ist definiert durch den Erwartungswert

$$\langle \Psi | e \mathbf{r} | \Psi \rangle. \quad (5)$$

- Eine andere Möglichkeit ist die folgende: Finde die Energieverschiebung der Niveaus mit $n = 2$ in erster Ordnung Störungstheorie. Leite die Energie nach dem elektrischen Feld ab, um daraus den gleichen Ausdruck für das Dipolmoment zu erhalten.

Hinweis: Wird die Länge in Einheiten des Bohrschen Radius a_0 skaliert, lauten die Zustände des ungestörten Wasserstoffatoms $\Psi_{2,l,m}$:

$$\Psi_{2,0,0} = -\frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-\frac{r}{2}} \quad (6)$$

$$\Psi_{2,1,0} = -\frac{1}{\sqrt{32\pi}} r e^{-\frac{r}{2}} \cos \theta \quad (7)$$

$$\Psi_{2,1,1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} r e^{-\frac{r}{2}} \sin \theta e^{i\phi} \quad (8)$$

$$\Psi_{2,1,-1} = -\frac{1}{8\sqrt{\pi}} r e^{-\frac{r}{2}} \sin \theta e^{-i\phi} \quad (9)$$

Aufgabe 14.3 Grundzustandsenergie von H_2^+
(Variationsansatz)

In dieser Übung soll das Ritz-Rayleigh-Verfahren als eine weitere approximative Lösungsmethode angewendet werden. Wir betrachten das ionisierte H_2 -Molekül, in dem sich ein Elektron im anziehenden Potential zweier Protonen an den Stellen \mathbf{X}_A und \mathbf{X}_B befindet. Der Hamilton-Operator für das Elektron lautet

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{X}_A|} - \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{X}_B|} + \frac{e^2}{|\mathbf{X}_A - \mathbf{X}_B|}. \quad (10)$$

Als Variationsansatz soll die Superposition von 1s-Atom-Wellenfunktionen gewählt werden. Der Ansatz für die symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktion lautet somit

$$\Psi_{\pm}(\mathbf{x}) = C_{\pm} (\Psi_A(\mathbf{x}) \pm \Psi_B(\mathbf{x})). \quad (11)$$

Berechne die Energieminima der symmetrischen und antisymmetrischen Wellenfunktion (falls vorhanden) als Funktion von $R := |\mathbf{X}_A - \mathbf{X}_B|$ und stelle den Zusammenhang zwischen Energie und Protonenabstand R graphisch dar.

C. M.