Vorbemerkung

Dies ist ein abgegebener Übungszettel aus dem Modul physik421.

Dieser Übungszettel wurde nicht korrigiert. Es handelt sich lediglich um meine Abgabe und keine Musterlösung.

Alle Übungszettel zu diesem Modul können auf http://martin-ueding.de/de/university/bsc_physics/physik421/ gefunden werden.

[disclaimer]

physik421 – Übung 11

Gruppe 4 – Franz Niecknig

Martin Ueding *

2014-07-07

H 18. Der Stark-Effekt

H 18a. Störterm, Dipolmoment

Die Einstellenergie eines elektrischen Dipols ist:

$$-\boldsymbol{E}\boldsymbol{d}$$

Das elektrische Dipolmoment $\boldsymbol{d}$ ist über die Ladungsdichte ϱ definiert als:

$$\boldsymbol{d} = \int \mathrm{d}^3x \, \boldsymbol{x} \, \varrho(\boldsymbol{x})$$

Somit kommt der neue Term hinzu.

H 18b. Störterm in Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned} H' &= e\boldsymbol{E}\boldsymbol{x} \\ &= eE\hat{\boldsymbol{e}}_3\boldsymbol{x} \\ &= eEr\cos(\theta) \end{aligned}$$

H 18c. Verschwinden der Matrixelemente

Laut [?] unterscheiden sich gerade und ungerade Wellenfunktionen in der Parität. Es ist also zu zeigen, dass gilt:

$$\langle n,l,m| H' |n',l',m\rangle \neq 0 \implies |n-n'| \mod 2 = 1$$

*mu@uni-bonn.de

Ein derartiges Matrixelement ist ausgeschrieben:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi\, r^2 \int_{-1}^1 \mathrm{d}\cos\theta\, R^*_{nl}(r) Y^*_{lm}(\theta,\phi) eEr\cos(\theta) R_{n'l'}(r) Y_{l'm}(\theta,\phi)$$

Die Kugelflächenfunktionen bestehen aus einem θ- und einem ϕ-Anteil, wobei letzterer den Absolutbetrag 1 hat. Somit fällt der in diesem Integral weg, da m auf beiden Seiten gleich ist. Der θ-Anteil wird mit $\xi = \cos(\theta)$ zu einem Polynom, das entweder gerade oder ungerade ist. Im Integral steht noch ein ξ drin, womit es bei der Integration über das zentrierte Integral $[-1, 1]$ darauf ankommt, dass der Integrand insgesamt eine gerade Funktion ist. Dies ist nur gegeben, wenn die Y^*Y eine ungerade Funktion ist, also Y^* und Y verschiedene Paritäten aufweisen. Die Symmetrie der Y hängt von l ab, diese müssen verschieden sein.

H 18d. Verschiebung ab Ordnung

Ich probiere die Energieverschiebung bei der ersten Ordnung der Störung einfach aus:

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle n| H' |n\rangle$$

Im Grundzustand $|1,0,0\rangle$:

$$\begin{aligned}\Delta E_0^{(1)} &= \int_0^\infty \mathrm{d}r \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_{-1}^1 \mathrm{d}\cos\theta\, r^2 \frac{2}{a_0^{3/2}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) eEr\cos(\theta) \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \\ &= \frac{8\pi eE}{a_0^3} \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^3 \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \\ &> 0\end{aligned}$$

Also tritt schon bei der ersten Ordnung eine Energieverschiebung auf.

H 18e. Diagonalisieren des Störterms

Die vier Entartungszustände sind:

$$\begin{aligned} E_{20}&: |2,0,0\rangle \\ E_{21}&: |2,1,-1\rangle, |2,1,0\rangle, |2,1,1\rangle \end{aligned}$$

Als Basis für H' wähle ich die Energieeigenbasis von H selbst, also die vier Zustände. Dabei ist die Basis in dieser Reihenfolge:

$$\{\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4\} = \{\, |2,0,0\rangle,\ |2,1,-1\rangle,\ |2,1,0\rangle,\ |2,1,1\rangle\,\}$$

Die Matrixelemente sind dann:

$$H'_{ij} = \langle i| H' |j\rangle$$

Die Integrale, die dahinter stecken, sind wie oben angegeben zu rechnen. Dies habe ich mit Mathematica gerechnet. Das Mathematica Notebook ist ganz am Ende dieser Abgabe. Als Matrix erhalte ich, wenn ich das, wofür es wohl die meisten Punkte in dieser Aufgabe gibt, an Mathematica abgebe:

$$\boldsymbol{H}' = -3a_0 Ee \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Von den Einheiten kommt der Vorfaktor auch hin:

$$\mathrm{m} \cdot \mathrm{V\,m^{-1}} \cdot \mathrm{C} = \mathrm{V} \cdot \mathrm{C} = \mathrm{J}$$

Die Eigenwerte und Vektoren dieser Matrix sind:

$$-1: \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$1: \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$0: \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Somit sind die neuen Zustände also:

$$|1'\rangle \propto -|2,0,0\rangle + |2,1,0\rangle$$
$$|2'\rangle \propto -|2,0,0\rangle - |2,1,0\rangle$$
$$|3'\rangle \propto |2,1,1\rangle$$
$$|4'\rangle \propto |2,1,-1\rangle$$

Die Eigenwerte geben mir die Energie. Diese ist für die Zustände 1 und 2 $\mp 3a_0 Ee$, und für die Zustände 3 und 4 null. Diese Zustände haben also keine Energieverschiebung.

H 18f. Erwartungswerte

Der Dipoloperator ist:

$$d = -e\boldsymbol{x}$$

Die 3-Komponente sollte dann sein:

$$d_3 = -ez = -er\cos(\theta)$$

Die Erwartungswerte sind $\langle n'| d_3 |n'\rangle$, auch dies lasse ich mit Mathematica rechnen. Ich erhalte als Erwartungswerte:

$$-6a_0e, \quad 6a_0e, \quad 0, \quad 0$$