

- [P1] Zur *Feinstruktur-Aufspaltung*: Als (eine) relativistische Korrektur zum Hamiltonoperator  $H_0$  des Wasserstoffatoms gibt es einen zusätzlichen Potentialbeitrag, die *Spin-Bahn-Kopplung*

$$H' = \frac{1}{2m^2c^2} (\vec{L} \cdot \vec{S}) \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( -\frac{e^2}{r} \right).$$

- (1) Zeigen Sie, daß  $J_z$ ,  $(\vec{J})^2$ ,  $(\vec{L})^2$  mit  $H_0$  und  $H'$  vertauschen.  
 (2) Berechnen Sie den Beitrag von  $H'$  zu den ersten beiden Energieniveaus des Wasserstoffatoms in erster Ordnung Störungstheorie. Geben Sie das Ergebnis in [eV] an.

Hinweis: Die  $2p$ -Radialfunktion des Wasserstoffatoms lautet

$$u_{2p}(r) = \frac{1}{\sqrt{3(2a_0)^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}},$$

wobei  $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$  der Bohrsche Radius ist. Nutzen Sie, daß  $\frac{e^2}{\hbar c} \equiv \alpha \approx \frac{1}{137}$  und die Grundzustandsenergie des Wasserstoffatoms  $-\frac{e^2}{2a_0} \approx 13.6\text{eV}$  ist.

Bemerkung: Leider ist die Sache nicht wirklich so einfach. Tatsächlich wird nämlich in erster Ordnung die Entartung für  $j = \frac{1}{2}$  durch die relativistische Energie-Impuls-Beziehung wieder hergestellt. Wird das Wasserstoffatom vollständig relativistisch behandelt (Dirac-Gleichung), findet man die Feinstruktur-Aufspaltung erst in zweiter Ordnung.

- [P2] *Erwartungswerte  $\langle r^k \rangle$  im Wasserstoffatom*: Zeigen Sie, daß die Erwartungswerte  $\langle r^k \rangle$  im Eigenzustand  $|n\ell m\rangle$  des Wasserstoffatoms die Rekursionsbeziehung

$$\frac{k+1}{n^2} \langle r^k \rangle - (2k+1)a_0 \langle r^{k-1} \rangle + \frac{k}{4} ((2\ell+1)^2 - k^2) a_0^2 \langle r^{k-2} \rangle = 0,$$

die sogenannte *Kramersche Rekursionsformel*, erfüllen. Hierbei ist  $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$  der Bohrsche Radius. Gehen Sie wie folgt vor:

- (1) Aus der Vorlesung kennen Sie die Radialgleichung für das Wasserstoffatom, die auch in der folgenden Form angegeben werden kann:

$$\left[ \partial_\rho^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} + \varepsilon \right] u_{n\ell}(\rho) = 0.$$

Hierbei sind  $\rho = \frac{r}{a_0}$  und  $\varepsilon = \frac{E}{E_1}$ . Multiplizieren Sie mit  $\rho^{k+1} \partial_\rho u_{n\ell}(\rho) - \frac{1}{2}(k+1)\rho^k u_{n\ell}(\rho)$  und integrieren Sie über  $\rho$ .

- (2) Berechnen Sie mit Hilfe obiger Rekursionsformel die Erwartungswerte  $\langle r \rangle$  und  $\langle r^2 \rangle$ . Dazu benötigen Sie den Erwartungswert  $\langle r^{-1} \rangle$ , den Sie aus dem Virialsatz und der Beziehung  $E = -\langle \frac{p^2}{2m} \rangle$  erhalten:  $\langle n\ell m | r^{-1} | n\ell m \rangle = \frac{1}{a_0 n^2}$ .

[H1] *Periodisches Potential:* Betrachten Sie das eindimensionale Problem eines Teilchens, das sich in einem periodischen Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{wenn } n\ell < x < n\ell + a, \\ V_0 & \text{wenn } n\ell - b < x < n\ell, \end{cases} \quad n \in \mathbb{Z},$$

bewegt. Es sei (zunächst)  $E < V_0$ , so daß die „Wellen“zahlen

$$\kappa_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{und} \quad \kappa_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

lauten. Bestimmen Sie die erlaubten Energiebänder, indem Sie wie folgt vorgehen:

(1) Stellen Sie Ansätze für  $\psi(x)$  für  $0 < x < a$  und  $a < x < \ell$  auf. Es ist sehr hilfreich, die Ansätze in  $\cosh \kappa(x-a)$ ,  $\frac{1}{\kappa} \sinh \kappa(x-a)$  und trigonometrischen Funktionen so zu machen, daß die Anschlußbedingungen für  $x = a$  automatisch erfüllt sind.

(2) Wie in der Vorlesung gezeigt, muß es eine Matrix  $M = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$  geben, so daß

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(\ell) \\ \psi'(\ell) \end{pmatrix}$$

ist. Stellen Sie möglichst einfache Gleichungen für  $\alpha, \dots, \delta$  auf, indem Sie die freien Konstanten in Ihrem Ansatz für  $\psi(x)$  so wählen, daß  $\begin{pmatrix} \psi(0) \\ \psi'(0) \end{pmatrix}$  einmal proportional zu  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  und einmal zu  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  wird.

(3) Nutzen Sie die Bedingung  $|\text{tr} M| = |\alpha + \delta| \leq 2$ , um aus den gefundenen Gleichungen die Bedingung

$$|\cos \kappa_1 a \cosh \kappa_2 b + \frac{\kappa_2^2 - \kappa_1^2}{2\kappa_1 \kappa_2} \sin \kappa_1 a \sinh \kappa_2 b| \leq 1 \quad (*)$$

abzuleiten.

(4) Gehen Sie nun zu dem Grenzfall  $a \gg b$ ,  $E \ll V_0$  mit  $\kappa_2 b \ll 1$  über. Drücken Sie die obige Bedingung (\*) in diesem Grenzfall als  $1 \leq |f(\kappa_1 a, \gamma)|$  aus, d.h. als Funktion allein von  $\kappa_1 a$  und  $\gamma = \frac{mV_0}{\hbar^2} ab$ . Skizzieren Sie  $f(\kappa_1 a, \gamma)$  für  $\gamma = 5$  und markieren Sie die erlaubten Energiebänder als erlaubte Bereiche von  $\kappa_1 a$ . (Computer!)

(5) Betrachten Sie einen anderen Spezialfall, nämlich  $a = b$ . Setzen Sie  $\kappa_1 a = \eta$  und  $\kappa_2 a = \sqrt{\xi^2 - \eta^2}$ . Drücken Sie (\*) nun als Funktion von  $\eta$  und  $\xi$  aus, d.h.  $1 \leq |g(\eta, \xi)|$ . Aus der Vorlesung wissen Sie, daß genauer gilt:

$$\cos K\ell = g(\eta, \xi), \quad (**)$$

wobei  $K$  der (*reduzierte*) *Ausbreitungsvektor* genannt wird.

(6) Für den Fall  $E > V_0$ , d.h.  $\eta^2 > \xi^2$ , können Sie ebenfalls eine Gleichung der Form (\*\*) aufstellen, indem Sie einfach  $\sqrt{\xi^2 - \eta^2}$  durch  $i\sqrt{\eta^2 - \xi^2}$  ersetzen. Skizzieren Sie schließlich die erlaubten Energiebänder in der  $(k\ell, 2\kappa_1 a)$ -Ebene, indem Sie die parametrisch definierte Funktion

$$\{x = \arccos[g(\eta, \xi)], y = 2\eta\}$$

für  $\xi = 2$  und sowohl für  $E < V_0$  als auch für  $E > V_0$  betrachten. (Computer!) (10 P.)