

### Aufgabe 4.1 Spin-Bahn Kopplung und Zeeman Effekt

Für ein nichtrelativistisches Elektron in einem radialsymmetrischen Potential  $V(r)$  hängt die Energie  $E_{nl}$  der Zustände  $|nlm\sigma\rangle$  weder von der magnetischen Quantenzahl  $m$  und noch vom Spin  $\sigma$  ab. In dieser Aufgabe betrachten wir, wie diese Entartung durch die Anwesenheit eines homogenen Magnetfeldes  $\vec{H}$  parallel zur  $z$ -Achse und durch den relativistischen Effekt der Spin-Bahn Kopplung in erster Ordnung Störungstheorie aufgehoben wird. Der Hamilton Operator der Störung  $H'$  ist im  $2(2l+1)$  dimensionalen Hilbertraum  $\mathcal{H} = \text{span}(|nlm\sigma\rangle, m = -l \dots l, \sigma = \pm 1/2)$  durch

$$H' = \kappa \vec{L} \cdot \vec{S} + \frac{eH_z}{2mc} (L_z + 2S_z).$$

gegeben, wobei  $\kappa = \frac{1}{2m^2c^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle_{nl}$ .

- Berechne die Aufspaltung in erster Ordnung Störungstheorie, falls  $H_z$  so gross ist, dass der zweite Term dominiert (Paschen-Back Effekt). Wie gross muss der Betrag des magnetischen Feldes  $H_z$  für den Fall des Wasserstoffatoms mindestens sein, damit diese Näherung gerechtfertigt ist?
- Berechne nun in erster Ordnung Störungstheorie die Aufspaltung der Energie durch  $H'$  im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  für beide Terme gleichzeitig. Dazu muss die  $2(2l+1) \times 2(2l+1)$  Matrix  $\langle nlm\sigma | H' | nlm'\sigma' \rangle$  diagonalisiert werden. Da  $[J_z, H'] = 0$  gilt, ist diese Matrix schon Block-diagonal.
- Vergleiche den Fall  $x := \mu_B H_z / (\kappa \hbar^2) = 0$  mit (11.108) und zeige, dass wir für  $x \ll 1$  und gegebenes  $j$  die Zeeman-Aufspaltung

$$\Delta E_{nljm_J} = g_{lj} \mu_B H_z m_J \quad m_J = -j, \dots, j \quad (1)$$

mit  $g_{l,l+1/2} = \frac{2+2l}{1+2l}$  und  $g_{l,l-1/2} = \frac{2l}{1+2l}$  erhalten.

Skizziere die in (b) berechneten Eigenwerte für  $l = 1$  als Funktion von  $x$ .

### Aufgabe 4.2 Hartree-Näherung

Bestimme approximativ die Wellenfunktion und die Energie für den (1s)(2p)-Zustand von Helium in der Hartree-Näherung mit Hilfe des Variationsprinzips von Rayleigh-Ritz, wobei als Variationsparameter die effektiven Kernladungen für den (1s)-Zustand,  $Z_{1s}^{\text{eff}} \equiv \alpha$ , und für den (2p)-Zustand,  $Z_{2p}^{\text{eff}} \equiv \beta$ , genommen werden.

Vergleiche das Resultat mit der gemessenen Ionisierungsenergie für den Singulett- und Triplett-Zustand ( $E_S^{2p} = 0.247 \text{ Ry}$ ,  $E_T^{2p} = 0.266 \text{ Ry}$ ).

### Aufgabe 4.3 Identische Teilchen

Der Hamiltonoperator von  $N$  Teilchen sei gegeben durch

$$H = H_0 + H_{\text{ww}} = \sum_{j=1}^N \frac{p_j^2}{2m} + U \sum_{i < j} \delta(r_i - r_j) \quad (2)$$

Berechne in erster Ordnung Störungstheorie die Energie des Grundzustandes für den Fall, dass die Teilchen

- a) spinlose Bosonen
- b) Spin 1/2 Fermionen

sind. Man gebe ferner den Druck des Grundzustandes