Aufgabe 19: Wasserstoffatom im äußeren Magnetfeld (schriftlich, 10 Punkte)

Für ein Wasserstoffatom im äußeren Magnetfeld $\vec{B} = B\,\vec{e}_z$ sei der Hamiltonoperator

$$H = H_0 + \frac{e\,B}{2\,m}\left(L_z + 2\,S_z\right) + \frac{e^2}{8\,\pi\,\varepsilon_0\,m^2\,c^2\,r^3}\,\vec{L}\cdot\vec{S} = H_0 + H_1$$

gegeben. Dabei ist H_0 der Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms ohne Magnetfeld und ohne Spin-Bahn-Kopplung. Die Eigenwerte $E_n^{(0)}$ und die Eigenzustände $|n,\,l,\,m_l,\,m_s\rangle$ von H_0 werden als bekannt vorausgesetzt. Dabei sind l und $s = \frac{1}{2}$ die Quantenzahlen zu den Drehimpulsoperatoren L^2 und S^2, m_l und m_s diejenigen zu L_z und S_z, n ist die Hauptquantenzahl. Die $2\,p$-Zustände $|2,\,1,\,m_l,\,m_s\rangle$ sind bzgl. m_l und m_s entartet. Gesucht ist die Aufspaltung dieser Niveaus in erster Ordnung Störungstheorie.

Anmerkung: Da l weiterhin eine gute Quantenzahl ist, müssen die ebenfalls entarteten $2\,s$-Zustände hier nicht betrachtet werden.

a) [5P] Berechnen Sie zunächst die Matrixelemente $\langle n,\,l,\,m_l,\,m_s|L_z + 2\,S_z|n,\,l,\,m_l',\,m_s'\rangle$ und $\langle n,\,l,\,m_l,\,m_s|\vec{L}\cdot\vec{S}\,|n,\,l,\,m_l',\,m_s'\rangle$ für $n = 2,\ l = 1,\ s = 1/2$. Drücken Sie dabei $\vec{L}\cdot\vec{S}$ durch die Operatoren $L_\pm$, $S_\pm$, L_z und S_z aus. Bestimmen Sie damit die Matrixelemente des Störoperators H_1. Verwenden Sie dazu die Radialfunktion

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{1}{2\,a}\right)^{3/2}\frac{r}{a}\,e^{-\frac{r}{2\,a}}$$

mit dem Bohr-Radius $a = \dfrac{4\,\pi\,\varepsilon_0\,\hbar^2}{m\,e^2}$. Führen Sie die beiden Abkürzungen

$$\kappa = \frac{e\,\hbar\,B}{2\,m} \qquad \text{und} \qquad \lambda = \frac{e^2\,\hbar^2}{384\,\pi\,\varepsilon_0\,m^2\,c^2\,a^3}$$

ein.

b) [3P] Stellen Sie die zugehörige Säkulargleichung auf und lösen Sie diese. Bestimmen Sie damit die sechs Energieeigenwerte in erster Ordnung Störungstheorie.

c) [2P] Diskutieren Sie das Ergebnis für die Grenzfälle $\kappa \ll \lambda$ (Zeeman-Effekt) und $\kappa \gg \lambda$ (Paschen-Back-Effekt) und skizzieren Sie den Verlauf der Energien als Funktion von κ für festes λ.

Aufgabe 20: Räumliche Drehung (mündlich, 5 Punkte)

a) [1P] Betrachten Sie Drehimpuls-Eigenzustände $|l,\, m\rangle$ eines Atoms.

Bei einer Drehung um die z-Achse (um einen Winkel α) unterliegen die $|l,\, m\rangle$ einer unitären Transformation $\hat{U}\,(\alpha)$. Zeigen Sie, dass $\hat{U}\,(\alpha)\,|l,\, m\rangle \;=\; \mathrm{e}^{-i\,m\,\alpha}\,|l,\, m\rangle$ gilt.

b) [3P] Betrachten Sie eine Drehung (um Winkel α) um die x-Achse. Hierbei gilt nun

$$\hat{U}\,(\alpha)\,|l,\, m\rangle \;=\; \sum_{m'\,=\,-l}^{l} U^{(l)}_{m\,m'}\,(\alpha)\,|l,\, m'\rangle\ .$$

Bestimmen Sie $U^{(l)}_{m\,m'}\,(\alpha)$ für den Fall $l \;=\; 1$ (p-Zustände).

c) [1P] Formulieren Sie das Ergebnis aus b) unter Verwendung der Basis $\{|p_x\rangle,\, |p_y\rangle,\, |p_z\rangle\}$.

Aufgabe 21: Symmetrie-Operationen im Molekül (mündlich, 5 Punkte)

Betrachten Sie das Methan-Molekül (CH_4), das tetraedrische Symmetrie aufweist (wählen Sie der Einfachheit halber das C-Atom als Koordinatenursprung und für die H-Atome die Positionen $a\,\cdot\,(1,\,1,\,1)$, $a\,\cdot\,(-1,\,-1,\,1)$, $a\,\cdot\,(-1,\,1,\,-1)$ und $a\,\cdot\,(1,\,-1,\,-1)$, mit $a \;=\; d/\sqrt{3}$ und der C-H Bindungslänge $d \,=\, 1.1\,\text{Å}$). In diesem Molekül ist die $2\,p$-Schale des C-Atoms komplett gefüllt (zwei $2\,p$-Elektronen vom C-Atom selbst, plus 4 Elektronen, die von den H-Atomen „abgegeben“ werden).

a) [3P] Unter welchen Drehungen wird das Molekül auf sich selbst abgebildet?

b) [2P] Zeigen Sie, dass der Unterraum der $2\,p$-Zustände des C-Atoms unter all diesen Operationen irreduzibel ist. Was bedeutet das für die zugehörigen Energieniveaus?

[Betrachten Sie hier nur die Winkelabhängigkeit der Zustände, nicht ihre Radialabhängigkeit. Der Einfachheit halber sollten Sie mit den Basisfunktionen

$$|p_x\rangle = \sqrt{3/4\pi}\;x/r\ , \qquad |p_y\rangle = \sqrt{3/4\pi}\;y/r \qquad \text{und} \qquad |p_z\rangle = \sqrt{3/4\pi}\;z/r\ ,$$

statt $|l = 1, m\rangle$ argumentieren.]

Bitte erläutern Sie die Wirkung der Symmetrieoperatoren auf die einzelnen p-Zustände anschaulich/qualitativ, ohne aufwändige Rechnung – im vorliegenden Falle „sieht“ man die Wirkung der Symmetrien „mit bloßem Auge“!