Aufgabe 39: Dipolauswahlregeln (6 Punkte)

Gegeben seien die atomaren Anfangs- und Endzustände

$$\begin{aligned}|i\rangle &= |\mathcal{E},\, l\rangle \cdot |l,\, m\rangle \cdot |s,\, m_s\rangle \;, \\ |f\rangle &= |\mathcal{E}',\, l'\rangle \cdot |l',\, m'\rangle \cdot |s',\, m_{s'}\rangle \;,\end{aligned}$$

wobei $\langle r|\mathcal{E},\, l\rangle = R_{\mathcal{E},l}\,(r)$ eine Radialfunktion und $\langle \vartheta,\, \varphi|l,\, m\rangle = Y_{l,m}\,(\vartheta,\, \varphi)$ eine Kugelfunktion sei.

Zeigen Sie mit Hilfe des Winkel- und Spinfunktionsanteils der Zustände, dass die Dipolauswahlregeln

i) $m_s - m_{s'} =: \Delta\, m_s = 0$

ii) $m - m' =: \Delta\, m = 0,\, \pm 1$

iii) $l - l' =: \Delta\, l = \pm 1$

gelten müssen, wenn das Dipolmatrixelement $\langle f|\hat{\mathbf{r}}|i\rangle$ nicht verschwinden soll. Das Integral über den Radialteil der Wellenfunktion braucht hierfür nicht behandelt zu werden.

Hinweis: Zum Beweis der dritten Auswahlregel ist die folgende Kommutatorrelation

$$[\hat{L}^2,\, [\hat{L}^2,\, \hat{\mathbf{r}}]] = 2\,\hbar^2\, \left\{\hat{\mathbf{r}}\, \hat{L}^2 + \hat{L}^2\, \hat{\mathbf{r}}\right\}$$

sehr nützlich. Setzen Sie $l = \Delta\, l + l'$ um die Auswahlregel herzuleiten.

Aufgabe 40: He und He-ähnliche Ionen: Coulomb-Integrale (12 Punkte)

Bei der Behandlung von He und He-ähnlichen Ionen haben wir in der Vorlesung die Ergebnisse folgender Coulomb-Integrale

$$V\,(r_2) = \int \varphi_{100}\,(Z\,r_1)\,\frac{e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\,\varphi_{100}\,(Z\,r_1)\,d^3\,r_1$$

und

$$W_{12} = \int\!\!\int \varphi_{100}\,(Z\,r_2)\,\varphi_{100}\,(Z\,r_1)\,\frac{e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\,\varphi_{100}\,(Z\,r_1)\,\varphi_{100}\,(Z\,r_2)\,d^3\,r_1 \cdot d^3\,r_2$$

mit

$$\varphi_{100}\,(Z\,r_i) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_B}\right)^{3/2}\,\mathrm{e}^{-Z\,r_i/a_B}\;, \qquad i = 1,\, 2\;,$$

verwendet.

a) Berechnen Sie $V\,(r_2)$.

b) Berechnen Sie W_{12}.

c) Fassen Sie $V(r_2)$ mit der Coulomb-Anziehung zwischen Elektron 2 und dem Kern zum effektiven Potential

$$V_{\text{eff}}(r_2) := -\frac{Z\,e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,r_2} + V(r_2) =: -\frac{Z_{\text{eff}}(r_2)\,e^2}{4\,\pi\,\varepsilon_0\,r_2}$$

zusammen.

$V_{\text{eff}}(r_2)$ ist das Potential, das Elektron 2 näherungsweise „spürt", wenn Elektron 1 in einem wasserstoffähnlichen Grundzustand am Kern gebunden ist.

$Z_{\text{eff}}(r_2)$ ist die effektive Kernladung, die Elektron 2 im Abstand r_2 vom Kern „sieht".

d) Skizzieren oder zeichnen Sie die drei unterschiedlichen Potentialtypen, die in $V_{\text{eff}}(r_2)$ auftreten, und $Z_{\text{eff}}(r_2)$ für He, d. h. für $Z = 2$.

Hinweis: Das Problem der Berechnung von W_{12} und $V(r_2)$ liegt darin, dass die Elektron-Elektron-Wechselwirkung nicht faktorisiert. Hilfreich ist es, z. B. Kugelkoordinaten mit der z_1-Achse parallel zu $\mathbf{r}_2$ einzuführen.

Aufgabe 41: He und He-ähnliche Ionen: Variationsrechnung (6 Punkte)

Berechnen Sie die Energie des Grundzustandes $E_g(\lambda)$ von He und He-ähnlichen Ionen mit Hilfe des Variationsansatzes

$$\psi_{\text{Sing}}(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2) = \varphi_{100}(\lambda\,r_1)\,\varphi_{100}(\lambda\,r_2)\,|0,\,0\rangle\ ,$$

wobei $|0,\,0\rangle$ der Spin-Singulett-Zustand und

$$\varphi_{100}(\lambda\,r_i) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{\lambda}{a_B}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-\lambda\,r_i/a_B}\ , \qquad i = 1,\,2$$

eine wasserstoffähnliche Einteilchen-Grundzustandsfunktion ist.

Minimalisieren Sie $E_g(\lambda)$ und geben Sie $E(\lambda_0)$ an.

Hinweis: Mit Hilfe einer Skalentransformation lassen sich alle Integrale auf die vom Wasserstoffatom bekannten Terme $\langle\hat{T}\rangle$ und $\langle\hat{V}\rangle$, sowie auf das aus Aufgabe 40 bekannte $W_{12} = \langle\hat{W}_{12}\rangle$ zurückführen.