

Stärke Effekt

Betrachte Wasserstoffatom in elektrischen Feld:

$$H = H_0 + e \vec{E} \vec{r}$$

Zur Vereinfachung wähle $\vec{E} = E \vec{e}_z \rightarrow V = e E r \cos \varphi$

Erinnerung: $\psi_{2p}(r, \vartheta, \varphi)$ in Basis (n, l, m) darstellbar

Für Winkelanteil: $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ mit:

Orthogonalisierung: $\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{lm}^* Y_{l'm'} \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$

Komplexe Konjugation: $Y_{lm}^* = (-1)^m Y_{l, -m}$ $\rightarrow Y_{lm}^* = Y_{l, -m}$ (wegen $Y_{l0}^* = Y_{l0}$)

$Y_{00} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}}$, $Y_{10} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \vartheta$, $Y_{1\pm 1} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$

$Y_{lm} = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l-m)!}{(2l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$

Radialteil: $R_{10} = \sqrt{\frac{4}{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$, $R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24 a_0^3}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$
 $R_{20} = \frac{1}{\sqrt{30 a_0^3}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$

Energielevels: $E_n = -\frac{R}{n^2} \rightarrow$ Entartungsgrad n^2 ($l \in [0, n-1] \cap \mathbb{N}$, $m \in [-l, l] \cap \mathbb{Z}$)

Grundzustand: Entartungsgrad $g = 1^2 = 1 \rightarrow$ nicht entartet

$\rightarrow E_1^{(1)} = \langle 100 | V | 100 \rangle$ Winkelanteil $V: \cos \vartheta = 2\sqrt{\frac{\pi}{3}} Y_{10}$
 $= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |R_{10}(r)|^2 e E r \cdot Y_{00}^*(\vartheta, \varphi) 2\sqrt{\frac{\pi}{3}} Y_{10}(\vartheta, \varphi) Y_{00}(\vartheta, \varphi) r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi dr$
 $= \int_0^\infty |R_{10}(r)|^2 e E r^2 dr \cdot \underbrace{\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{10} Y_{00} \sin \vartheta d\vartheta d\varphi}_{= \delta_{10} \delta_{00} = 0}$
 $= 0$

Angeregte Zust. e: Entartungsgrad $g = n^2$, $n \geq 1 \rightarrow g \geq 1$

\rightarrow 1. angeregte Zust. Entartungsgrad 4, $n=2$, $(l, m) \in \{(0,0), (1,0), (1,\pm 1)\}$

\rightarrow da n eindeutig: kein Mischen durch R_{el}
 um V zu diagonalisieren genügt Winkelteil:

$\langle 2l'm' | V | 2l'm \rangle$: Diagonalelemente: $|2l|^2$ ist gerade Fkt.,
 $r \cos \vartheta$ ist ungerade Fkt.
 $\rightarrow \int |2l|^2 r \cos \vartheta d^3r = 0$

m, m' -Komponenten: V unabhängig von φ , $\rightarrow \varphi$ geht nur mit m
 $\rightarrow \varphi$ -Integration liefert $\delta_{mm'}$
 \rightarrow keine Mischung von Zuständen mit versch. m

Mischung möglich zwischen $(l, m) = (0,0)$ und $(1,0)$

\rightarrow in Basis $\{|200\rangle, |210\rangle, |21-1\rangle, |211\rangle\}$ ist $\langle 2l'm' | V | 2l'm \rangle$:
 $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow$ Submatrix $\begin{pmatrix} 0 & \delta \\ \delta & 0 \end{pmatrix}$ hat EWe $\pm \delta$ mit $E_{W0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $E_{W1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

\Rightarrow Energiekor. $\pm \delta = E = \left(\int_0^\infty R_{20}^*(r) r R_{21}(r) r^2 dr \right) \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{00}^* Y_{10} Y_{10} Y_{00} \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$
 $= \frac{e}{\sqrt{2}} \underbrace{\int_0^\infty r^4 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{a_0}} dr}_{= -\frac{25}{2} a_0^5} \underbrace{\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{00}^* Y_{10} Y_{10} Y_{00} \sin \vartheta d\vartheta d\varphi}_{= 1} = -\frac{25}{2} e a_0$