Heiko Dumlich, Max Hoffmann 4. Februar 2007

13 Übungsblatt Theoretische Physik IV

13.1 (Variationsmethode)

Wir betrachten die Testfunktionen

$$\psi_{lm}(\vec{r}) = r^l \exp(-\alpha r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

für das Wasserstoffproblem, wobei die variationellen Abschätzungen der niedrigsten Energien zu den Drehimpulsquantenzahlen $l = 1$ und $l = 2$ zu bestimmen sind. Es ist dazu mit dem exakten Ergebnis zu vergleichen. Für das Wasserstoffproblem gilt der Hamiltonian:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}.$$

Der Energieerwartungswert der Testfunktion ist gegeben mit:

$$E[\psi] = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}. \tag{1}$$

Betrachten des Falles $l = 1$ liefert:

$$\psi_{1m}(\vec{r}) = r \exp(-\alpha r) Y_{1m}(\theta, \varphi)$$

mit $m = -1, 0, 1$. Betrachten wir den Erwartungswert:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_0^\infty dr\, r^4 \exp(-2\alpha r) \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, Y^*_{1m}(\theta, \varphi) Y_{1m}(\theta, \varphi)$$

Es gilt die Orthogonalitätsbeziehung $\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, Y^*_{l'm'}(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta_{l'l}\delta_{m'm}$, somit folgt also:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_0^\infty dr\, r^4 \exp(-2\alpha r)$$

Dies lässt sich vereinfachen zu:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_0^\infty dr \frac{\partial^4}{\partial\alpha^4}\frac{1}{2^4}\exp(-2\alpha r) = \frac{1}{2^4}\frac{\partial^4}{\partial\alpha^4}\left[-\frac{1}{2\alpha}\exp(-2\alpha r)\right]_0^\infty = \frac{1}{2^5}\frac{\partial^4}{\partial\alpha^4}\frac{1}{\alpha}$$

Wir erhalten:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \frac{1}{2^5}\frac{24}{\alpha^5} = \frac{3}{4}\frac{1}{\alpha^5}.$$

Betrachten wir das Potential (Faktoren vernachlässigt):

$$\langle\psi|\frac{1}{r}|\psi\rangle = \int_0^\infty dr\, r^3 \exp\left(-2\alpha r\right) = \int_0^\infty dr \frac{\partial^3}{\partial\alpha^3}\frac{(-1)}{2^3}\exp\left(-2\alpha r\right) = \frac{1}{2^4}\frac{\partial^3}{\partial\alpha^3}\left(-\frac{1}{\alpha}\right)$$

Für den Erwartungswert für dieses folgt also:

$$\langle\psi|\frac{1}{r}|\psi\rangle = \frac{6}{2^4}\frac{1}{\alpha^4} = \frac{3}{8}\frac{1}{\alpha^4}.$$

Es ist nun noch $T = \langle\psi|\frac{\vec{p}^2}{2m}|\psi\rangle$ zu berechnen mit (Laplace Operator in Kugelkoordinaten: $\nabla^2\psi = \Delta\psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}$):

$$\begin{aligned}
\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi &= \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right] \\
&= \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{Y_{1m}\left(\theta,\varphi\right)}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}r\exp\left(-\alpha r\right)\right) \\
&+ \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{r\exp\left(-\alpha r\right)}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}Y_{1m}\left(\theta,\varphi\right)\right) \\
&+ \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{r\exp\left(-\alpha r\right)}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}Y_{1m}\left(\theta,\varphi\right)
\end{aligned}$$

Für die Kugelflächenfunktionen gilt, da sie Eigenfunktionen des Winkelanteils des LaPlace Operators sind:

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y_{lm}\left(\theta,\varphi\right) = -l\left(l+1\right)Y_{lm}\left(\theta,\varphi\right)$$

Somit vereinfacht sich der obere Term zu:

$$\begin{aligned}
\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_{1m} &= \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}r\exp\left(-\alpha r\right)\right) - r\exp\left(-\alpha r\right)\cdot 1\cdot(1+1)\right]Y_{1m}\left(\theta,\varphi\right) \\
&= \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left(2r - 4\alpha r^2 + \alpha^2 r^3\right)\exp\left(-\alpha r\right)Y_{1m}\left(\theta,\varphi\right) \\
&- \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left(2r\exp\left(-\alpha r\right)\right)Y_{1m}\left(\theta,\varphi\right) \\
&= \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left(\alpha^2 r^3 - 4\alpha r^2\right)\exp\left(-\alpha r\right)Y_{1m}\left(\theta,\varphi\right)
\end{aligned}$$

Wir erhalten hiermit ein T von:

$$T = \langle\psi|\frac{\vec{p}^2}{2m}|\psi\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{-\hbar^2}{2m}\int_0^\infty dr\, r\exp(-\alpha r)\left(\alpha^2 r^3\exp(-\alpha r) - 4\alpha r^2\exp(-\alpha r)\right)\int d\Omega\, Y_{1m}^* Y_{1m}\\
&= \frac{-\hbar^2}{2m}\int_0^\infty dr\,\left(\alpha^2 r^4\exp(-2\alpha r) - 4\alpha r^3\exp(-2\alpha r)\right)\\
&= \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\alpha^2\frac{3}{4}\frac{1}{\alpha^5} - \frac{3}{8}\frac{4\alpha}{\alpha^4}\right)\\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3}{4}\frac{1}{\alpha^3}\right)
\end{aligned}
$$

Einsetzen in (1) liefert:

$$
\begin{aligned}
E[\psi] &= \frac{\langle\psi|T - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\\
&= \frac{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3}{4}\frac{1}{\alpha^3}\right) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{3}{8}\frac{1}{\alpha^4}}{\frac{3}{4}\frac{1}{\alpha^5}}\\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2}\alpha
\end{aligned}
$$

Ableiten nach α und Nullsetzen, liefert:

$$
\begin{aligned}
0 &= \frac{\hbar^2}{2m}2\alpha - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2}\\
\alpha &= \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{m}{\hbar^2} = \frac{1}{2}\frac{1}{a_0}
\end{aligned}
$$

Setzen wir dies ein, erhalten wir für die Energie:

$$
E[\psi] = \frac{1}{8}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{a_0} - \frac{1}{4}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{a_0} = -\frac{1}{4}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2a_0}.
$$

Vergleich mit dem exakten Ergebnis ($l = 0, \ldots, n-1 \Rightarrow n_{min} = l+1$):

$$
E_0^{exakt}|_{n=2} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2a_0}\frac{1}{4} = E[\psi] = -\frac{1}{4}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2a_0}
$$

zeigt, dass die Testfunktion den genau identischen Wert liefert.
Betrachten wir den Fall $l = 2$:

$$
\psi_{2m}(\vec{r}) = r^2\exp(-\alpha r)\, Y_{2m}(\theta,\varphi)
$$

Wir gehen "äquivalent" vor wie für den Fall $l = 1$, wobei wir wiederum die Orthogonalitätsbeziehung benutzt können:

$$
\langle\psi|\psi\rangle = \int_0^\infty dr\, r^6\exp(-2\alpha r)
$$

Die Formel, die man aus den bisherigen Rechnungen ableiten kann:

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty dr\, r^n \exp(-2\alpha r) &= \int_0^\infty dr\ (-1)^n \frac{1}{2^n}\frac{\partial^n}{\partial\alpha^n}\exp(-2\alpha r) \\
&= (-1)^n \frac{1}{2^n}\frac{\partial^n}{\partial\alpha^n}\left[-\frac{1}{2\alpha}\exp(-2\alpha r)\right]_0^\infty \\
&= (-1)^n \frac{1}{2^{n+1}}\frac{\partial^n}{\partial\alpha^n}\frac{1}{\alpha} \\
&= (-1)^n \frac{1}{2^{n+1}}\frac{\partial^n}{\partial\alpha^n}\frac{1}{\alpha} \\
&= (-1)^{2n} \frac{n!}{2^{n+1}\alpha^{n+1}} \\
&= \frac{n!}{2^{n+1}\alpha^{n+1}}
\end{aligned}$$

beschleunigt die folgenden Rechnungen. Wir setzen $n = 6$ und erhalten:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \frac{6!}{2^7\alpha^7} = \frac{45}{8\alpha^7}.$$

Der Erwartungswert des Potentials ergibt sich als:

$$\langle\psi|\frac{1}{r}|\psi\rangle = \int_0^\infty dr\, r^5 \exp(-2\alpha r) = \frac{5!}{2^6\alpha^6} = \frac{15}{8\alpha^6}.$$

Um den T Term zu bestimmen, berechnen wir zuerst:

$$\begin{aligned}
\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_{2m} &= \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}r^2\exp(-\alpha r)\right) - r^2\exp(-\alpha r)\cdot 2\cdot(2+1)\right] Y_{2m}(\theta,\varphi) \\
&= \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left[6r^2 - 4\alpha r^3 - 2\alpha r^3 + \alpha^2 r^4 - 6r^2\right]\exp(-\alpha r)\, Y_{2m}(\theta,\varphi) \\
&= \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left[\alpha^2 r^4 - 6\alpha r^3\right]\exp(-\alpha r)\, Y_{2m}(\theta,\varphi)
\end{aligned}$$

dies eingesetzt in T liefert:

$$\begin{aligned}
T &= \langle\psi|\frac{\vec{p}^2}{2m}|\psi\rangle \\
&= \frac{-\hbar^2}{2m}\int_0^\infty dr\, r^4\exp(-\alpha r)\frac{1}{r^2}\left[\alpha^2 r^4 - 6\alpha r^3\right]\exp(-\alpha r)\int d\Omega Y_{2m}^* Y_{2m} \\
&= \frac{-\hbar^2}{2m}\int_0^\infty dr\ \left[\alpha^2 r^6 - 6\alpha r^5\right]\exp(-2\alpha r) \\
&= \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\alpha^2\frac{45}{8\alpha^7} - 6\alpha\frac{15}{8\alpha^6}\right]
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{45}{8\alpha^5} - 2\frac{45}{8\alpha^5}\right] \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{45}{8\alpha^5}\right).
\end{aligned}
$$

Insgesamt erhalten wir also, wenn wir in (1) einsetzen:

$$
\begin{aligned}
E[\psi] &= \frac{\langle\psi|T - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \\
&= \frac{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{45}{8\alpha^5}\right) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{3}\frac{45}{8\alpha^6}}{\frac{45}{8\alpha^7}} \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{3}\alpha
\end{aligned}
$$

Hieraus erhalten wir durch bilden der Ableitung und Nullsetzen:

$$
\begin{aligned}
0 &= \frac{\hbar^2}{2m}2\alpha - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{3} \\
\alpha &= \frac{1}{3}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{m}{\hbar^2} = \frac{1}{3}\frac{1}{a_0}.
\end{aligned}
$$

Setzen wir dies wiederum ein:

$$
E[\psi] = \frac{1}{18}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{a_0} - \frac{1}{9}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{a_0} = -\frac{1}{9}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{_0}.
$$

Der Vergleich mit dem exakten Wert offenbart:

$$
E_0^{exakt}|_{n=3} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2a_0}\frac{1}{9} = E[\psi] = -\frac{1}{9}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2a_0},
$$

auch den identischen Wert.
Hieraus kann man die allgemeine Formel:

$$
E[\psi] = \frac{E_0^{exakt}}{(l+1)^2},
$$

ablesen, wir erhalten also immer die exakte Lösung durch die gegebenen Testfunktionen.

13.2 (Anharmonischer Oszillator)

Zu berechnen sind die Störterme erster Ordung Störungstheorie des anharmonischen Oszillators

$$
\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \gamma\hat{x}^4, \gamma > 0
$$

Wir stellen den Störterm in der darstellungsfreien Basis

$$\{|n\rangle\}$$

dar mit

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)$$

folgt

$$\hat{x}^4 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)^4 .$$

Um die Rechnung noch irgendwie nachvollziehbar zu gestalten definieren wir kurzzeitig die Symbole

$$a := \hat{a} \qquad b := \hat{a}^\dagger$$

mit dem Kommutator

$$[a, b] = 1$$

was nur dazu dienen soll die Lesbarkeit zu erhöhen und merken uns, dass es sich stets um Operatoren handelt. Dann rechnen wir aus:

$$\begin{aligned}
(a+b)^4 &= (a+b)^2 (a+b)^2 \\
&= \left(a^2 + b^2 + ab + ba\right)^2 \\
&= \left(a^2 + b^2 + 2ba + 1\right)^2 \\
&= a^4 + a^2b^2 + a^2 2ba + a^2 + b^2a^2 + b^4 + 2b^3a + b^2 \\
&+ 2ba^3 + 2bab^2 + 4baba + 2ba + a^2 + b^2 + 2ba + 1
\end{aligned}$$

Jetzt erinnern wir uns, dass nur die Terme mit Potenzen von ba einen Eigenwert ungleich null liefern (mit $ba = \hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{N}$ dem Zahloperator mit $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$, $bbaa|n\rangle = n(n-1)|n\rangle = \left(n^2 - n\right)|n\rangle$ und $aabb|n\rangle = (n+1)(n+2)|n\rangle = \left(n^2 + 3n + 2\right)|n\rangle$), denn wenn die Anzahl der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ungleich sind, erhalten wir nicht mehr den Eigenket $|n\rangle$. Wir können also ein paar Terme, die Nullen liefern wegfallen lassen, somit folgt:

$$\hat{H}_1 = \gamma\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (a+b)^4 = \gamma\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \left(a^2b^2 + b^2a^2 + 4baba + 4ba + 1\right)$$

Für die Energiekorrekturen ergibt sich:

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle n|\hat{H}_1|n\rangle = \gamma\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \left(n^2 + 3n + 2 + n^2 - n + 4n^2 + 4n + 1\right)$$

Dies kann man noch zusammenfassen zu:

$$\Delta E_n^{(1)} = \gamma\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 \left(3 + 6n^2 + 6n\right) = \gamma\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2 (3 + 6n(n+1))$$

als Energiekorrektur. Um gültige Einheiten zu erhalten muss

$$[\gamma] = \frac{kg}{(ms)^2}$$

sein.

13.3 (Stark-Effekt für Grundzustand des Wasserstoffatoms)

Wir betrachten ein Wasserstoffatom, dass sich in einem äußeren homogenen elektrischen Feld E in z-Richtung befindet, dessen Potential $V_1(\vec{r}) = eEz$ lautet.

a)

Es ist zu zeigen, dass die Korrektur $\Delta E_0^{(1)}$ der Grundzustandsenergie in erster Ordnung Störungstheorie verschwindet.

Für die Energiekorrekturen 1. Ordnung gilt

$$\Delta E_n^{(1)} = \left\langle \psi_{nlm} \left| \hat{V} \right| \psi_{nlm} \right\rangle .$$

Wir betrachten den Grundzustand des Wasserstoffatomes, sprich

$$\begin{aligned} \psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) &= R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \\ &= N_{nl} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2n+l}(\rho) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \end{aligned}$$

wie im Abschnitt 9 der Vorlesung diskutiert, mit den Quantenzahlen $n, l, m = 1, 0, 0$. Dabei ist

$$\rho = \frac{2Zr}{na_0}$$

wobei in diesem Fall $Z = 1$. Das assoziierte LAGUERRE-Polynom $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ ist in diesem Fall

$$L_0^2(\rho) = 1.$$

Die Normierungskonstante wurde in Aufgabe 8.3 berechnet:

$$N_{10} = 2\sqrt{\frac{1}{a_0^3}}$$

und die Kugelflächenfunktion ist für $l = m = 0$ konstant

$$Y_{00}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Entscheidend ist noch das Potential in Kugelkoordinaten auszudrücken:

$$V(\mathbf{r}) = eEz \hat{=} eEr\cos\vartheta$$

um den Erwartungwert auszuschreiben:

$$\Delta E_0^{(1)} = \left\langle \psi_{100} \left| \hat{V} \right| \psi_{100} \right\rangle = \iiint dr d\vartheta d\varphi \; r^2 \sin\vartheta eEr\cos\vartheta \left(\frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} \right).$$

Weil aber

$$\begin{aligned} \int_0^\pi d\vartheta \;\; \sin\vartheta\cos\vartheta &= \int_0^\pi d\vartheta \; \frac{\sin(2\vartheta)}{2} \\ &= \frac{1}{2}\left[-\cos(2\vartheta)\right]_0^{2\pi} = \frac{1}{2}\left[1-1\right]_0^{2\pi} = 0 \end{aligned}$$

gilt, verschwindet die Energiekorrektur der Grundzustandenergie in erster Ordnung.

b)

Die Energiekorrekturen 2. Ordnung sind in diesem Fall gegeben durch

$$\Delta E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{\left|\left\langle k^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| n^{(0)} \right\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

wir addieren eine $0 = \langle n^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle$ und betrachten die Grundzustandenergie:

$$\Delta E_0^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{\left|\left\langle k^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| n^{(0)} \right\rangle\right|^2}{E_1^{(0)} - E_k^{(0)}} + \frac{\left|\left\langle n^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| n^{(0)} \right\rangle\right|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} > \frac{1}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \sum_k \left|\left\langle k^{(0)} \middle| \hat{V} \middle| n^{(0)} \right\rangle\right|^2$$

mit dieser Abschätzung $\left(\frac{1}{E_1^{(0)}-E_k^{(0)}} > \frac{1}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\right)$ erhalten wir:

$$\begin{aligned}
\Delta E_0^{(2)} &> \frac{1}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \sum_k \langle n^{(0)}|\hat{V}|k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|\hat{V}|n^{(0)}\rangle \\
&= \frac{1}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \langle 100|\hat{V}^2|100\rangle \\
&= \frac{\iiint dr d\Omega\; r^2 \left(e^2E^2r^2\cos^2\vartheta\right) \left|R_{10}(r)\, Y_{00}\right|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \\
&= \frac{\frac{e^2E^2}{4\pi} \iiint dr d\vartheta d\varphi\; r^4 \sin\vartheta\cos^2\vartheta \left|R_{10}(r)\right|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}
\end{aligned}$$

Berechnen der Winkelanteile des Integrals liefert:

$$\begin{aligned}
\Delta E_0^{(2)} &> \frac{\frac{e^2E^2}{4\pi} \iiint dr d\vartheta d\varphi\; r^4 \sin\vartheta\cos^2\vartheta \left|R_{10}(r)\right|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \\
&= \frac{\frac{e^2E^2}{4\pi}\frac{2}{3}2\pi \int_0^\infty dr\; r^4 \left|R_{10}(r)\right|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}
\end{aligned}$$

wobei $\int_0^\pi d\vartheta\, \sin\vartheta\cos^2\vartheta = \left[-\cos^3\vartheta\right]_0^\pi - 2\int_0^\pi d\vartheta\, \sin\vartheta\cos^2\vartheta \Rightarrow \int_0^\pi d\vartheta\, \sin\vartheta\cos^2\vartheta = \frac{1}{3}\left[-\cos^3\vartheta\right]_0^\pi = \frac{2}{3}$ ist.
Für die Radialwellenfunktion gilt:

$$R_{10}(r) = 2\sqrt{\frac{1}{a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}$$

einsetzen liefert also:

$$\Delta E_0^{(2)} > \frac{\frac{e^2E^2}{a_0^3}\frac{4}{3}\int_0^\infty dr\ r^4 e^{-\frac{2r}{a_0}}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}$$

mit $\int_0^\infty dr\, r^n e^{-2\alpha r} = \frac{n!}{2^{n+1}\alpha^{n+1}}$ und $\frac{1}{\alpha} = a_0$ folgt:

$$\Delta E_0^{(2)} > \frac{\frac{e^2E^2}{a_0^3}\frac{4}{3}\frac{4!}{2^5\alpha^5}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = \frac{\frac{4}{3}\frac{3}{4}e^2E^2a_0^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}$$

Dies liefert:

$$\Delta E_0^{(2)} > \frac{e^2E^2a_0^2}{-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2a_0} + \frac{1}{4}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{2a_0}} = -\frac{8}{3}\left(4\pi\varepsilon_0\right)a_0^3E^2$$

$\square$