

4. Übungsblatt zur Theoretischen Physik II

Relativistische Energiekorrekturen

Abgabe: Montag 20. November 2006 bis 13:00 Uhr in den Briefkasten im Physik-Altbau.

Aufgabe 12 (16 Punkte): *Erwartungswerte*

In dieser Aufgabe betrachten wir als Vorbereitung für relativistische Korrekturen das nichtrelativistische Wasserstoffatom (bzw. wasserstoffähnliche Ionen). Für den Radialanteil der Eigenfunktionen $u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$ gilt die folgende Schrödinger-Gleichung

$$\tilde{H}u_{nl}(r) = \tilde{E}u_{nl}(r)$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}, \\ \tilde{E} &= \frac{1}{(N+l+1)^2} \quad (n = N+l+1), \\ \rho &= \frac{m_e Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} r. \end{aligned}$$

(a) Zeigt mit Hilfe des Virialsatzes die Gültigkeit von

$$\langle nlm | r^{-1} | nlm \rangle = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{m_e Z e^2}{\hbar^2 n^2}.$$

(Der Virialsatz wird im Tutorium eingeführt.)

(b) Zeigt unter der Verwendung der oben angegebenen Schrödinger-Gleichung, dass

$$\langle nlm | r^{-2} | nlm \rangle = \left(\frac{m_e Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right)^2 \frac{1}{n^3 (l+1/2)}$$

gilt. Betrachtet hierfür die Projektion der partiellen Ableitung nach l der Schrödinger-Gleichung auf u_{nl} .

(c) Verifiziert den folgenden Erwartungswert

$$\langle nlm | r^{-3} | nlm \rangle = \left(\frac{m_e Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right)^3 \frac{1}{n^3 l (l+1/2) (l+1)} \quad (l \neq 0).$$

Geht hierfür analog zu Aufgabenteil (b) vor – nur dass man hier die partielle Ableitung nach ρ betrachten sollte.

Aufgabe 13 (24 Punkte): *Relativistische Energiekorrekturen*

Zu dem bekannten nichtrelativistischen Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms H_0 wurden in der VL zusätzliche relativistische Korrekturterme berechnet:

$$E\vec{\varphi}_1 = \left[\underbrace{\left(\frac{p^2}{2m_e} + q\phi(\vec{r}) \right)}_{=H_0} - \underbrace{\frac{p^4}{8m_e^3 c^2}}_{=H_1} - \underbrace{\frac{\hbar^2 q \Delta \phi}{8m_e^2 c^2}}_{=H_2} + \underbrace{\frac{q \partial_r \phi(r)}{2m_e^2 c^2 r} \vec{s} \cdot \vec{l}}_{=H_3} \right] \vec{\varphi}_1.$$

Dabei ist H_1 der Term, den man bei der Berücksichtigung höherer Potenzen bei der Entwicklung des relativistischen Ausdrucks für die Energie erhält, H_2 der Darwin-Term und H_3 die Spin-Bahn-Kopplung. Das ungestörte Eigenwertproblem $H_0 |nlm\rangle = E_n |nlm\rangle$ ($|nlm\rangle = \varphi_{nlm}(\vec{r})$) und das Kernpotenzial $\phi(r)$ seien bekannt. Jetzt sollen die Energiekorrekturen in erster Ordnung Störungstheorie berechnet werden. Sei W ein Störoperator, dann ist die Energiekorrektur erster Ordnung gegeben durch das Matrixelement $\langle nlm | W | nlm \rangle = \int d^3r \varphi_{nlm}^*(\vec{r}) W(\vec{r}) \varphi_{nlm}(\vec{r})$.

- (a) Leitet die Abhängigkeit der Energiekorrektur $\langle nlm|H_1|nlm\rangle$ von den Energieeigenwerte des ungestörten Wasserstoff-Atoms E_n , dem Erwartungswert $\langle nlm|r^{-1}|nlm\rangle$ und dem Erwartungswert $\langle nlm|r^{-2}|nlm\rangle$ her.
Tipp: Nutzt und zeigt, dass $H_1 = -\frac{1}{2m_e c^2} \left(H_0 + \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)^2$ gilt.
- (b) Warum verschwindet die Energiekorrektur $\langle nlm|H_2|nlm\rangle$ für alle Zustände außer den s-Zuständen ($l = 0$)? Berechnet die Energiekorrektur. (*Tipp:* $|\varphi_{nlm}(0)|^2 = \frac{4\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)^4} \left(\frac{m_e Z e^2}{n\hbar^2} \right)^3 \delta_{l,0}$).
- (c) Berechnet den Energiekorrektur $\langle n, j = l \pm 1/2, l, m_j|H_3|n, j, l, m_j\rangle$ in Abhängigkeit von dem Term $\langle n, j, l, m_j|r^{-3}|n, j, l, m_j\rangle$, wobei j die Gesamtdrehimpulsquantenzahl ist. Dabei ist es zweckmäßig den Term $\vec{s} \cdot \vec{l}$ mit Hilfe von \vec{j}^2 , \vec{l}^2 und \vec{s}^2 darzustellen. (*Einführung des Gesamtdrehimpuls \vec{j} im Tutorium und der Vorlesung*)
- (d) Berechnet die gesamte Energiekorrektur unter Verwendung der Ergebnisse aus Aufgabe 12.
Tipp: Betrachtet die beiden Fälle $j = l \pm 1/2$ getrennt voneinander. Versucht erst eine allg. Formel zu finden, nachdem Ihr die Energiekorrekturen die zu H_1 und H_3 gehören addiert habt. Außerdem ist es auch sinnvoll die beiden Fälle $l \neq 0$ und $l = 0$ zu unterscheiden.
 Die Energieeigenwerte des ungestörten Wasserstoffatoms (bzw. wasserstoffähnlichen Ions) lauten:

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

- (e) Skizziert die Energieverschiebung für die Fälle $n = 2, l = 0, 1$.

- **Internetseite der Veranstaltung:** <http://www.itp.tu-berlin.de/tpii-ws06.html>
- **Vorlesung:** Mittwoch 12:15 - 14:00 Uhr und Freitag 10:15 - 12:00 Uhr im PN 203
- **Ergänzungen zur Quantenmechanik:** Vorlesung von Prof. Muschik findet mittwochs von 8:30 bis 10:00 Uhr im Raum P 164 statt
- **Literatur:**
 - U. Scherz, Quantenmechanik - Eine kompakte Einführung (Teubner, 2005)
 - R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, Feynman Vorlesungen über Physik, Band 3, Quantenmechanik (Oldenburg, 2001)
 - W. Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 5/1 und 5/2 (Springer, 2002)
 - F. Schwabl, Quantenmechanik I+II (Springer 1993)
 - C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, Quantenmechanik 1 und 2 (de Gruyter 1999)
- **Scheinkriterien:** 50% der Punkte aus den Übungszetteln, aktive Teilnahme an den Tutorien und bestandene Klausur
- **Sprechstunden:** Prof. Dr. A. Knorr Di, 13:00 - 14:00 Uhr PN 742
 Jan Schlesner Do, 13:30 - 14:30 Uhr PN 627/28
 Die restlichen Sprechstunden werden nach Einteilung der Tutorien bekanntgegeben.
- **Klausur:** Mittwoch, 7. Februar 2007, 12:00 - 14:00. Raum wird noch bekannt gegeben.
- **Mathematica-Kurs:** <http://www.physik.tu-berlin.de/pcpool/kurse/mathematica/>