Prof. Dr. Andreas Knorr
Dr. Carsten Weber
Dipl. Phys. Alexander Carmele
Dipl. Phys. Ken Lichtner

4. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Fr. 19.11.2010 12:00 Uhr im Briefkasten am Ausgang des ER-Gebäudes

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 11 (6 Punkte): *Erwartungswerte*

Für den Radialanteil $u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$ des nicht-relativistischen Wasserstoffatoms gilt die folgende Schrödingergleichung:

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

mit

$$\begin{aligned}\tilde{H} =& \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2},\\ \tilde{E} =& \frac{1}{(N+l+1)^2}, \qquad (n = N+l+1)\\ \rho =& \frac{m_e Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}r\end{aligned}$$

(a) Zeigen Sie die Gültigkeit von

$$\langle nlm \left| r^{-1} \right| nlm \rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{m_e Ze^2}{\hbar^2 n^2}.$$

(Der Virialsatz und das Hellmann-Feynman-Theorem werden im Tutorium eingeführt)

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

$$\langle nlm \left| r^{-2} \right| nlm \rangle = \left(\frac{m_e Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{n^3(l+\frac{1}{2})}.$$

(c) Zeigen Sie, dass

$$\langle nlm \left| r^{-3} \right| nlm \rangle = \left(\frac{m_e Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\right)^3 \frac{1}{n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \qquad (l \neq 0).$$

Aufgabe 12 (14 Punkte): *Relativistische Energiekorrekturen*

Zu dem bekannten nicht-relativistischen Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms H_0 wurden in der Vorlesung zusätzliche relativistische Korrekturterme berechnet:

$$E\varphi_1 = \left[\underbrace{\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + q\phi(r)\right)\hat{1}}_{=H_0} \underbrace{- \frac{\mathbf{p}^4}{8m_e^3c^2}\hat{1}}_{=H_1} \underbrace{- \frac{\hbar^2 q\rho}{8m_e^2c^2\varepsilon_0}\hat{1}}_{=H_2} \underbrace{+ \frac{q\partial_r\phi}{2m_e^2c^2r}\hat{\mathbf{s}}\cdot\mathbf{l}}_{=H_3}\right]\varphi_1$$

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 $H_0 \left|nlm\right\rangle = E_n \left|nlm\right\rangle$, mit $\langle \mathbf{r}|nlm\rangle = \varphi_{nlm}(\mathbf{r})$, und das Kernpotential $\phi(r)$ (Poisson: $\Delta\phi = -\rho/\varepsilon_0$) 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 $\langle nlm \left| W \right| nlm\rangle = \int d^3r \varphi^*_{nlm}(\mathbf{r})W(\mathbf{r})\varphi_{nlm}(\mathbf{r})$.

4. Übung TPV WS10/11

(a) Leiten Sie die Abhängigkeit der Energiekorrektur $\langle nlm \,|H_1|\, nlm\rangle$ von den Energieeigenwerten des ungestörten Wasserstoffatoms E_n, dem Erwartungswert $\left\langle nlm \left|r^{-1}\right| nlm\right\rangle$ und dem Erwartungswert $\left\langle nlm \left|r^{-2}\right| nlm\right\rangle$ her. Dazu ist es hilfreich zu zeigen, dass $H_1 = -\frac{1}{2m_e c^2}(H_0 + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r})^2$ gilt.

(b) Warum verschwindet die Energiekorrektur $\langle nlm \,|H_2|\, nlm\rangle$ für alle Zustände mit $l > 0$? Berechnen Sie die Energiekorrektur. (Tipp: $|\varphi_{nlm}(0)|^2 = \frac{4\varepsilon_0}{(4\pi\varepsilon_0)^4}(\frac{m_e Ze^2}{n\hbar^2})^3\delta_{l0}$).

(c) Berechnen Sie die Energiekorrektur $\langle n, j = l \pm 1/2, l, m_j \,|H_3|\, n, j, l, m_j\rangle$ in Abhängigkeit von dem Term $\left\langle n, j, l, m_j \left|r^{-3}\right| n, j, l, m_j\right\rangle$, wobei j die Gesamtdrehimpulsquantenzahl ist. Dabei ist es zweckmäßig den Term $\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{l}$ mit Hilfe von $\hat{\mathbf{j}}^2$,$\mathbf{l}^2$ und $\hat{\mathbf{s}}^2$ darzustellen.

(d) Berechnen Sie die gesamte Energiekorrektur. Die Energieeigenwerte des ungestörten Wasserstoffatoms (bzw. wasserstoffähnlichen Ions) lauten:

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2}$$