Prof. Dr. Andreas Knorr
Dr. Marten Richter, Dipl. Phys. Julia Kabuß, Wassilij Kopylov, MSc.

11. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Bis Di. 4.02.2014 8:25 vor Beginn der Vorlesung im EW 203

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Bitte das Tutorium und den Namen des Tutors auf dem Aufgabenzettel angeben! Die Abgabe erfolgt in maximal Vierergruppen.

Aufgabe 18 (8 Punkte): *Erwartungswerte*

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

$$\tilde{H}u_{nl}(r) = \tilde{E}u_{nl}(r) \tag{1}$$

mit

$$\tilde{H} = \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}, \tag{2}$$

$$\tilde{E} = \frac{1}{(N+l+1)^2}, \quad (n = N+l+1) \tag{3}$$

$$\rho = \frac{m_e Z e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2} r \tag{4}$$

(a) Zeigen Sie die Gültigkeit von

$$\langle nlm \left| r^{-1} \right| nlm \rangle = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{m_e Z e^2}{\hbar^2 n^2}. \tag{5}$$

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

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

$$\langle nlm \left| r^{-2} \right| nlm \rangle = \left(\frac{m_e Z e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2} \right)^2 \frac{1}{n^3 (l + \frac{1}{2})}. \tag{6}$$

(c) Zeigen Sie, dass

$$\langle nlm \left| r^{-3} \right| nlm \rangle = \left(\frac{m_e Z e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2} \right)^3 \frac{1}{n^3 l (l + \frac{1}{2})(l+1)} \qquad (l \neq 0). \tag{7}$$

Bitte Rückseite beachten!⟶

Aufgabe 19 (12 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 $H_0\,|nlm\rangle = E_n\,|nlm\rangle$, 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 $\langle nlm\,|W|\,nlm\rangle = \int d^3r\varphi^*_{nlm}(\mathbf{r})W(\mathbf{r})\varphi_{nlm}(\mathbf{r})$.

(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 $H_1 = -\frac{1}{2m_ec^2}(H_0 + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r})^2$ gilt.

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

(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:

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