

Prof. Sabine Klapp

Dr. Alexander Carnele, Dr. Malte Selig, Arne Zantop

4. Übungsblatt – Quantenmechanik II**Abgabe: Do. 21.11.2019 bis 12:00 Uhr, Briefkasten ER-Gebäude***Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.***Aufgabe 9 (8 Punkte): Erwartungswerte**Für den Radialanteil $u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$ des nicht-relativistischen Wasserstoffatoms gilt die folgende Schrödingergleichung:

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

mit

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

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

(4)
$$\rho = \frac{m_e Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} r$$

(a) Zeigen Sie unter Verwendung des im Tutorium besprochenen Virialsatzes die Gültigkeit von

(5)
$$\langle nlm | r^{-1} | nlm \rangle = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{m_e Z e^2}{\hbar^2 n^2}.$$

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

(6)
$$\langle nlm | r^{-2} | nlm \rangle = \left(\frac{m_e Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right)^2 \frac{1}{n^3(l + \frac{1}{2})}.$$

(c) Zeigen Sie, dass

(7)
$$\langle nlm | r^{-3} | nlm \rangle = \left(\frac{m_e Z e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right)^3 \frac{1}{n^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \quad (l \neq 0).$$

Aufgabe 10 (12 Punkte): Relativistische EnergiekorrekturenZu dem bekannten nicht-relativistischen Hamilton-Operator des Wasserstoffatoms H_0 wurden in der Vorlesung zusätzliche relativistische Korrekturterme berechnet:

$$E\varphi_1 = \left[\underbrace{\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + q\phi(r) \right)}_{=H_0} \hat{1} - \underbrace{\frac{\mathbf{p}^4}{8m_e^3 c^2}}_{=H_1} \hat{1} - \underbrace{\frac{\hbar^2 q\rho}{8m_e^2 c^2 \epsilon_0}}_{=H_2} \hat{1} + \underbrace{\frac{q\partial_r \phi}{2m_e^2 c^2 r} \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{l}}_{=H_3} \right] \varphi_1$$

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: $\Delta\phi = -\rho/\epsilon_0$) 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 $\langle nlm | W | nlm \rangle = \int d^3r \varphi_{nlm}^*(\mathbf{r}) W(\mathbf{r}) \varphi_{nlm}(\mathbf{r})$.

4. Übung QM2 WS19/20

- (a) Leiten Sie die Abhängigkeit der Energiekorrektur $\langle nlm | H_1 | nlm \rangle$ von den Energieeigenwerten des ungestörten Wasserstoffatoms E_n , dem Erwartungswert $\langle nlm | r^{-1} | nlm \rangle$ und dem Erwartungswert $\langle nlm | r^{-2} | nlm \rangle$ her. Dazu ist es hilfreich zu zeigen, dass $H_1 = -\frac{1}{2m_e c^2} (H_0 + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r})^2$ gilt.
- (b) Warum verschwindet die Energiekorrektur $\langle nlm | H_2 | nlm \rangle$ für alle Zustände mit $l > 0$? Berechnen Sie die Energiekorrektur. (Tipp: $|\varphi_{nlm}(0)|^2 = \frac{4\epsilon_0}{(4\pi\epsilon_0)^4} (\frac{m_e Z e^2}{\hbar^2})^3 \delta_{l0}$).
- (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 $\langle n, j, l, m_j | r^{-3} | n, j, l, m_j \rangle$, wobei j die Gesamtdrehimpulsquantenzahl ist. Dabei ist es zweckmäßig den Term $\hat{s} \cdot \hat{l}$ mit Hilfe von \hat{j}^2, \hat{l}^2 und \hat{s}^2 darzustellen.
- (d) Berechnen Sie die gesamte Energiekorrektur. Die Energieeigenwerte des ungestörten Wasserstoffatoms (bzw. wasserstoffähnlichen Ions) lauten:

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