

Repetitorium Theoretische Quantenmechanik, WS 08/09

Lösung

- 4.1** (Feinstruktur im Wasserstoffatom) Im Wasserstoffatom (und natürlich auch in allen anderen Atomen) erzeugt der Kern am Ort des Elektrons ein magnetisches Feld. Dieses Feld führt zu einer Aufhebung der energetischen Entartung der verschiedenen Drehimpulszustände zu einer Energie. Der Operator dieser Störung ist:

$$H_{FS} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 m^2 c^2} \frac{1}{r^3} L \cdot S$$

Berechnen Sie die Energiekorrekturen 1. Ordnung der stationären Zustände, durch diesen Störoperator.

(Hinweis: $\langle \frac{1}{r^3} \rangle = \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)n^3 a^3}$ für Eigenzustände zum Energieeigenwert $E_n = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a n^2}$)

Lösung:

In erster Ordnung stationärer Störungstheorie gilt:

$$\Delta E = \langle H_{FS} \rangle$$

Wir betrachten nun:

$$\langle LS \rangle = \langle \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right)$$

Damit und mit dem Hinweis folgt insgesamt:

$$\begin{aligned} \Delta E = \langle H_{FS} \rangle &= \frac{e^2 \hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2 c^2} \left(\frac{j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}}{l(l+1/2)(l+1)n^3 a^3} \right) = \\ &= \frac{E_n^2}{mc^2} \left(\frac{n(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4})}{l(l+1/2)(l+1)} \right) \end{aligned}$$

- 4.2** (Variationsrechnung)

Verwenden Sie die Variationsmethode um die Grundzustandsenergie des harmonischen Oszillators zu bestimmen. Verwenden Sie dafür eine gaußförmige Testfunktion.

$$\Psi(x) = A e^{-bx^2}$$

(Hinweis: Lösen Sie die Integrale indem Sie $\int_0^\infty t^s e^{-t} dt = \Gamma(s+1)$, $\Gamma(s+1) = s\Gamma(s)$ und $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$ verwenden. Weiterhin gilt: $\int_{-\infty}^\infty e^{-cx^2} = \sqrt{\frac{\pi}{c}}$)

Lösung:

Zunächst normieren wir die Testfunktion:

$$|\Psi(x)|^2 = |A|^2 \int_{-\infty}^\infty e^{-2bx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{2b}} = 1 \Rightarrow A = \left(\frac{2b}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}}$$

Nun berechnen wir die Erwartungswerte von kinetischer und potentieller Energie:

$$\begin{aligned}
 \langle T \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} \partial_x^2 e^{-2bx^2} dx \stackrel{\text{part.int.}}{=} \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\partial_x e^{-2bx^2} \right)^2 dx = \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} 4b^2 x^2 e^{-2bx^2} dx \stackrel{t:=2bx^2}{=} \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \int_0^{\infty} \sqrt{\frac{b}{2}} t^{\frac{1}{2}} e^{-t} dt = \frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \sqrt{\frac{b}{2}} \Gamma(3/2) = \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \sqrt{\frac{b}{2}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \frac{\hbar^2 b}{4m} \\
 \langle V \rangle &= \frac{1}{2} m \omega^2 \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2bx^2} dx \stackrel{(s.o.)}{=} \frac{1}{2} m \omega^2 \sqrt{\frac{2b}{\pi}} \sqrt{\frac{b}{2}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{4b^2} = \frac{m \omega^2}{16b}
 \end{aligned}$$

Damit gilt:

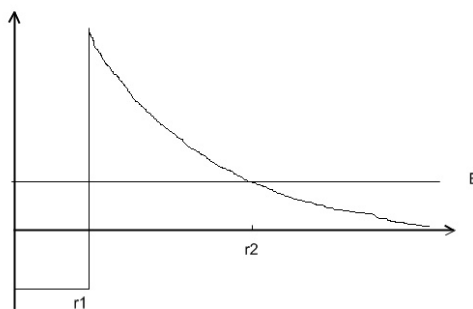
$$\begin{aligned}
 \langle H \rangle(b) &= \frac{\hbar^2 b}{4m} + \frac{m \omega^2}{16b} \Rightarrow \frac{d}{db} \langle H \rangle(b) = \frac{\hbar^2}{4m} - \frac{m \omega^2}{16b^2} \\
 &\Rightarrow b^2 = \frac{4m^2 \omega^2}{16 \hbar^2} \Rightarrow b = \frac{m \omega}{2 \hbar}
 \end{aligned}$$

Damit ist die Grundzustandsenergie in dieser Näherung:

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar \omega}{4} + \frac{\hbar \omega}{4} = \frac{\hbar \omega}{2}$$

4.3 (α -Zerfall)

Als Modell für den Mechanismus des α -Zerfalls wird folgendes Potential zugrundegelegt:



Rechts von der Barriere gilt dabei:

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2(Z-2)e^2}{r}$$

Man geht dabei davon aus, dass α -Teilchen sei schon im Kern vorhanden und seine kinetische Energie sei verantwortlich für das Überwinden der Potentialbarriere.

Die Lebensdauer des Teilchens ist dann proportional zur kinetischen Energie des α -Teilchens.

Berechnen Sie den Exponentialterm der kinetischen Energie in WKB-Näherung.

Lösung:

Es gilt:

$$\langle T \rangle \propto e^{-2\gamma}$$

$$\text{mit } \gamma := \frac{1}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2(Z-2)e^2}{r} - E \right)} dr.$$

Wir entnehmen aus dem Bild:

$$E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2(Z-2)e^2}{r_2}$$

und erhalten damit:

$$\gamma = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{r_2}{r} - 1} dr = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left(r_2 \arccos \left(\sqrt{\frac{r_1}{r_2}} \right) - \sqrt{r_1(r_2 - r_1)} \right)$$

Wir nehmen nun noch $r_1 \ll r_2$ an, da der Kern sehr klein ist.

Es folgt:

$$\arccos \left(\sqrt{\frac{r_1}{r_2}} \right) \approx \frac{\pi}{2} \Rightarrow \gamma \approx \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left(\frac{\pi}{2} r_2 - \sqrt{r_1 r_2} \right)$$

4.4 (Grundzustand des Heliumatoms)

Der Hamiltonoperator für das Heliumatom hat die Gestalt:

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|x_1 - x_2|} = H(1) + H(2) + V$$

Hier bezeichnet $H(i)$ einen Wasserstoffähnlichen Hamiltonoperator für die individuellen Elektronen und V die Wechselwirkung zwischen den beiden Elektronen.

Setzen Sie als radiale Grundzustandswellenfunktion unter Vernachlässigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung analog zum Wasserstoffatom an:

$$\Psi_i(r_1, r_2) = \frac{1}{\pi^{1/2}} \left(\frac{2}{a} \right)^{3/2} e^{-2(r_1+r_2)/a}$$

a) Berechnen Sie in Störungstheorie die Energiekorrekturen 1. Ordnung durch die $e^- - e^-$ -Wechselwirkung.

$$(\text{Hinweis: } \int_0^\pi \frac{\sin(\theta)}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\theta)}} d\theta = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\theta)}} d(\cos(\theta)) = \frac{2}{\max(r_1, r_2)})$$

Lösung:

Es gilt mit der angegebenen Grundzustandswellenfunktion (Beachten Sie, dass 2 e^- vorhanden sind!):

$$\langle V \rangle = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{8}{\pi a^3} \right)^2 \int \int \frac{e^{-4(r_1+r_2)/a}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d^3r_2 d^3r_1 =: \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{8}{\pi a^3} \right)^2 I_1 I_2$$

Wir berechnen nun zuerst I_2 :

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{r_2^2 \sin(\theta) e^{-4(r_2)/a}}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta}} d\phi d\theta dr_2 = \\ &= 4\pi \int_0^\infty \frac{1}{\max(r_1, r_2)} r_2^2 e^{-4(r_2)/a} dr_2 = \frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} r_2^2 e^{-4(r_2)/a} dr_2 + \int_{r_1}^\infty r_2 e^{-4(r_2)/a} dr_2 = \\ &\quad \underbrace{=}_{\text{part.int.}} \frac{\pi a^3}{8r_1} \left(1 - \left(1 + \frac{2r_1}{a} \right) e^{-4r_1/a} \right) \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis müssen wir nun noch d^3r_1 integrieren:

$$\begin{aligned} I_1 I_2 &= 4\pi \frac{\pi a^3}{8} \int_0^\infty r_1 \left(1 - \left(1 + \frac{2r_1}{a} \right) e^{-4r_1/a} \right) e^{-4r_1/a} dr_1 \underbrace{=}_{\text{part.int.}} \frac{5\pi^2 a^5}{256} \\ \Rightarrow \langle V \rangle &= \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{5}{4a} = \frac{5}{2} R_y = \frac{5}{4} R_y Z \end{aligned}$$

b) Erklären Sie die Energieänderung durch eine effektive Abschirmung der Kernladung auf einen Wert Z^*e und berechnen Sie mit Hilfe des Variationsprinzips den Wert von Z^* . Zerlegen Sie dazu zunächst den Hamiltonoperator in wasserstoffähnliche Operatoren mit Kernladung Z^*e + Korrekturterme.

(Hinweis: Aus dem Virialsatz folgt $\langle \frac{1}{r} \rangle = \frac{Z}{a}$)

Lösung:

Wir schreiben den Hamiltonoperator um:

$$H = H_{1Z^*} + H_{1Z^*} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Z^* - 2}{r_1} + \frac{Z^* - 2}{r_2} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right)$$

Es folgt für den Erwartungswert:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= -2Z^{*2} R_y + 2(Z^* - 2) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + \langle V \rangle = \\ &= - \left(2Z^{*2} - 4Z^*(Z^* - 2) - \frac{5}{4} Z^* \right) R_y \\ \Rightarrow Z^* &= \frac{27}{16} = 2 - \frac{5}{16} \end{aligned}$$

4.5 (Goldene Regel)

Ein ungestörtes System habe u.a. die stationären Eigenzustände $|m\rangle$ und $|n\rangle$. Zu Beginn befinde sich das System im Eigenzustand $|n\rangle$.

Nun werde zur Zeit $t = 0$ eine periodische Störung zugeschaltet:

$$V(t) = \Theta(t) (F e^{-i\omega t} + F^\dagger e^{i\omega t})$$

Berechnen Sie nun den Term:

$$\langle m(t) | n(t) \rangle$$

und in Analogie zur Vorlesung die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit. Interpretieren Sie die einzelnen Terme.

Lösung:

Analog zur Vorlesung schreiben wir:

$$\begin{aligned} |P_{nm}|^2 &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i(E_m - E_n)/\hbar t'} \langle m | V | n \rangle dt' \right|^2 = \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i(\omega_{mn} - \omega)t'} \langle m | F | n \rangle + e^{i(\omega_{mn} + \omega)t'} \langle m | F^\dagger | n \rangle dt' \right|^2 = \\ &\stackrel{\text{Vorlesung}}{=} \frac{2\pi t}{\hbar} \delta(E_m - E_n - \hbar\omega) |\langle m | F | n \rangle|^2 + \frac{2\pi t}{\hbar} \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) |\langle m | F^\dagger | n \rangle|^2 \end{aligned}$$

Man erkennt nun in der Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeitintervall folgende Terme:

$$\Gamma_{nm} = \underbrace{\frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_m - E_n - \hbar\omega) |\langle m | F | n \rangle|^2}_{\text{Teilchenabsorption}} + \underbrace{\frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_m - E_n + \hbar\omega) |\langle m | F^\dagger | n \rangle|^2}_{\text{Teilchenemission}}$$