

Theoretische Physik II: Quanten Mechanik, Übung 11

Prof. Hans Peter Büchler SS 2011, 12. Juli 2011

1. Van-der-Waals Wechselwirkung (Schriftlich)

Betrachte zwei Wasserstoffatome (A, B) in großem Abstand \mathbf{R} , so dass es zu keinem Überlapp der elektronischen Ladungsverteilungen kommt, und ortsfesten Kernen (Born-Oppenheimer-Näherung). Sei H_α der Hamiltonoperatoren eines einzelnen Wasserstoffatoms. Das System wird nun vollständig durch den Hamiltonoperator

$$H = H_A + H_B + H_{int} \quad (1)$$

beschrieben, wobei H_{int} die Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen und den positiv geladenen Kernen beschreibt, d.h.,

$$H_{int} = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|} - \frac{e^2}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_B|} - \frac{e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_A|}, \quad (2)$$

mit \mathbf{r}_i ($i \in A, B$) die Position der Elektronen in Bezug zum Kern i . Für grosse $\mathbf{R} \gg a_0$ (Bohr-Radius) entwickelt man H_{int} in Potenzen von \mathbf{r}_i/\mathbf{R} und erhält die Dipol-Dipol-Wechselwirkung

$$H_{int} = \frac{e^2}{R^3} \left[\mathbf{d}_A \mathbf{d}_B - \frac{3(\mathbf{d}_A \cdot \mathbf{R})(\mathbf{d}_B \cdot \mathbf{R})}{R^2} \right], \quad (3)$$

mit den Dipoloperatoren $\mathbf{d}_i = e\mathbf{r}_i$. Im folgenden wollen wir jetzt die Energiekorrektur des Zustandes $|g\rangle_A |g\rangle_B$ mit beiden Atomen im tiefsten Energiezustand $|g\rangle_i$ durch diese Störung berechnen. Dabei halten wir die Distanz \mathbf{R} zwischen den Atomen fixiert. Die Energiekorrektur $\Delta E(\mathbf{r})$ wird dadurch abhängig von der Distanz zwischen den Atomen und lässt sich in der sogenannten Born-Oppenheimer-Näherung als Wechselwirkung interpretieren.

- Zeige, dass die Störungstheorie in erster Ordnung keinen Beitrag liefert.
- Betrachte für die Störungstheorie 2. Ordnung ein vereinfachtes Modell, wobei wir annehmen, dass der Dipoloperator nur an einen angeregten Zustand $|e\rangle_i$ koppelt, d.h., $\langle e|\mathbf{d}_i|g\rangle_i = d/\sqrt{3}\mathbf{e}_z$ mit \mathbf{e}_z dem Einheitsvektor entlang der z-Achse. Zeige, dass die Energiekorrektur in zweiter Ordnung immer negativ ist, und somit eine Anziehung zwischen den Atomen beschreibt. Wie sieht die räumliche Abhängigkeit der induzierten Wechselwirkung aus? Zeige, dass die Wechselwirkung mit $1/R^6$ abfällt.
- Löse jetzt das Problem, wobei die Entartung im angeregten p-Zustand des Wasserstoffatoms berücksichtigt werden soll, d.h., jedes Atom hat die 3-fach entarteten Zustände $|2, 1, m\rangle$ mit Hauptquantenzahl $n = 2$, Drehimpuls $l = 1$, und $m = 0, \pm 1$. Zeige, dass die van-der-Waals Wechselwirkung nun ein isotropes Verhalten zeigt.

2. Wasserstoffatom und relativistische Korrektur (Übungsstunde)

- a) Berechne die mittlere Geschwindigkeit eines Elektrons im Grundzustand eines Wasserstoffatoms: $\bar{v} = \frac{\sqrt{\langle p^2 \rangle}}{m}$. Berechne das Verhältnis \bar{v}/c für das Wasserstoffatom.
- b) Die relativistischen Korrekturen für ein Elektron im Wasserstoffatom lassen sich exakt aus der Dirac-Gleichung ableiten, wenn man diese um $\frac{v}{c}$ entwickelt. In 2. Ordnung erhält man für den kinetischen Anteil der Energie:

$$T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{1}{2mc^2} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right)^2. \quad (4)$$

Diese beiden Terme, sind zusammen mit der Ruheenergie des Elektrons mc^2 , die drei führenden Terme in der Entwicklung der relativistischen kinetischen Energie

$$E = \sqrt{(m^2c^4 + c^2p^2)}. \quad (5)$$

Betrachte den Term $\sim \mathbf{p}^4$ als Störung und berechne explizit die Korrekturen für den Grundzustand. Tips: $-\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} = -\frac{1}{2mc^2} \left(\hat{H}_0 + \frac{Ze^2}{r} \right)^2$, $\langle r^{-1} \rangle_{n\ell} = \frac{Z}{n^2a_B}$ und $\langle r^{-2} \rangle_{n\ell} = \frac{Z^2}{m^2a_B^4e^4n^3} \left(\frac{1}{\ell + \frac{1}{2}} \right)$

- c) Berechne die Energiekorrekturen 1. Ordnung aller Zustände.