

Moderne Theoretische Physik I (Quantenmechanik I) SoSe 19

PROF. U. NIERSTE
DR. I. NISANDZIC

Übungsblatt 12
Abgabe: keine

Besprechung: Saalübungen, 16. 07. 2019

Name: _____ Matrikel-Nr: _____ Gruppe: _____

(Bitte ausfüllen und an die Lösung heften.)

Wichtiger Hinweis 1: Sie sollten die Lösungen für dieses Übungsblatt nicht abgeben. Die Punkte für dieses Übungsblatt werden in der Endnote nicht berücksichtigt. Die Diskussion über die Lösungen dieser Übung findet am Dienstag, den 16. Juli, in den Saalübungen statt.

Wichtiger Hinweis 2: Bitte beachten Sie, dass die Vorlesung am Freitag, 26. Juli, umgefahr eine halbe Stunde später (gegen 12:00 Uhr statt 11:30 Uhr) beginnt.

Aufgabe 22: Zweiatomige Moleküle

Zweiatomige Moleküle sind gebundene Systeme, die aus zwei einfachen Atomen aufgebaut sind. Um diese Bindung zu beschreiben, kann man das phänomenologische Morse-Potenzial

$$V(r) = V_0(1 - e^{-a(r-r_0)})^2$$

verwenden, wobei $V_0, a, r_0 > 0$ und $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ der Abstand zwischen den zwei Atomen ist. Dieses Zentralpotenzial führt zu Eigenzuständen der Form $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} u_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$, wobei $u_{n,l}(r)$ die Gleichung

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right] u_{n,l}(r) = E_{n,l} u_{n,l}(r)$$

erfüllt. Der Parameter μ ist die reduzierte Masse der zwei Atome $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$. Physikalisch beschreibt $u_{n,l}(r)$ die Schwingungsbewegung der Moleküle, während $Y_l^m(\theta, \phi)$ die Rotationsmoden beschreibt.

- a) Skizzieren Sie $V(r)$. Was ist die (klassische) physikalische Bedeutung von V_0 und r_0 ? Entwickeln Sie $V(r)$ als Taylorreihe um $r = r_0$ bis zur Ordnung $(r - r_0)^4$. Skizzieren Sie die Reihenentwicklung bis zur zweiten Ordnung in derselben Zeichnung.
- b) Nehmen Sie an, dass der Zentrifugalterm konstant im Bereich mit $u_{n,l}(r) \neq 0$ ist und setzen Sie $l(l+1)\hbar^2/2\mu r^2 \rightarrow l(l+1)\hbar^2/2\mu r_0^2$. Berücksichtigen Sie nur den quadratischen Term in der Entwicklung von $V(r)$ und bestimmen Sie die Schwingungs- und Rotationsniveaus?

- c) Betrachten Sie den kubischen Term in der Entwicklung von $V(r)$ als kleine Störung (genannt als anharmonische Störung). Berechnen Sie die Korrekturen zu den Energieniveaus in erster nicht-verschwindender Ordnung und die Eigenzustände in führender Ordnung. Geben Sie eine obere Grenze für die Quantenzahl n an, bis zu der die Rechnung noch sinnvoll ist. Hinweis: Drücken Sie zunächst die Störung durch Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren aus.
- d) Diskutieren Sie die Relevanz des Terms vierter Ordnung in der Entwicklung von $V(r)$, indem Sie die erste nicht-verschwindende Korrektur zu den Energieniveaus störungstheoretisch berechnen und diese Korrektur mit dem Ergebnis aus Aufgabe (c) kombinieren um

$$E_n = E_n^{(0)} - \hbar\omega \frac{\hbar\omega}{4V_0} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2$$

zu erhalten. Vergleichen Sie diese Niveaus grafisch mit denen aus Aufgabe (b).

Aufgabe 23: Stark Effekt

Betrachten sie ein Wasserstoffatom in einem konstanten elektrischen Feld \mathcal{E} , welches entlang der z -Achse orientiert ist, d.h. $\mathcal{E} = \mathcal{E}\mathbf{e}_3$. Dieses Feld tritt mit dem elektrischen Dipol des Atoms $e\mathbf{X}$ in Wechselwirkung. Addieren Sie die entsprechende Potenzialenergie zum Hamiltonoperator H_0 des Wasserstoffatoms. In Anwesenheit des Feldes \mathcal{E} lautet der Hamiltonoperator

$$H = H_0 + W_S \quad \text{mit} \quad W_S = e\mathcal{E} \cdot \mathbf{X} = e\mathcal{E}X_3 \quad .$$

- a) Beweisen Sie, dass die Energieverschiebung ΔE_1 des $n = 1$ Niveaus des Wasserstoffatoms quadratisch in \mathcal{E} ist. Wird die Energie erhöht oder abgesenkt?
- b) Betrachten Sie das $n = 1$ Niveau. Zeigen Sie, dass $d = \partial\Delta E_1/\partial\mathcal{E}$ ist, wobei d durch das angelegte elektrische Feld \mathcal{E} induzierte elektrische Dipol ist. Erklären Sie angesichts dessen warum ΔE_1 quadratisch in \mathcal{E} ist.
Hinweis: Der elektrische Dipol eines Atoms in Anwesenheit von \mathcal{E} ist

$$\mathbf{d} = {}^{(0)}\langle 1, 0, 0 | e\mathbf{X} | 1, 0, 0 \rangle^{(1)} + {}^{(1)}\langle 1, 0, 0 | e\mathbf{X} | 1, 0, 0 \rangle^{(0)} \quad ,$$

wobei $|1, 0, 0\rangle^{(0)}$ der ungestörte Grundzustand des Wasserstoffatoms und $|1, 0, 0\rangle^{(1)}$ die Korrektur erster Ordnung ist.

- c) Betrachten Sie die vier entarteten Zustände mit $n = 2$. Zeigen Sie, dass die Entartung für einige dieser Zustände aufgehoben wird und dies linear im elektrischen Feld ist. Berechnen Sie sowohl deren Energien als auch die gestörten Zustände.