

Kugelsymmetrische Potentiale

Symmetrien von Systemen ermöglichen eine vereinfachte Betrachtung des Problems. Kugelsymmetrische Potentiale ermöglichen es ein dreidimensionales Problem mittels Separation der Variablen auf ein eindimensionales Effektives zu vereinfachen. Im Folgenden betrachten wir einige physikalische Potentiale.

Aufgabe 1: Feynman-Hellmann Theorem für wasserstoffartige Ionen

(10 Punkte)

Gegeben sei ein physikalisches System mit Hamiltonian \hat{H} und Eigensystem $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$. Sei $\hat{H}(\lambda)$ abhängig von einem Parameter λ . Dann sind i.A. $E, |E\rangle$ ebenfalls explizit abhängig von λ .

(a) Beweisen Sie, dass wenn das System sich in einem Eigenzustand des Hamiltonians befindet, das Feynman (1939)-Hellmann (1937) Theorem gilt

$$\left\langle \frac{\partial \hat{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle = \frac{\partial \bar{E}(\lambda)}{\partial \lambda}, \quad (1)$$

wobei $\bar{E}(\lambda)$ die mittlere Energie des Systems ist. Als beispielhafte Anwendung betrachten wir wasserstoffartige Ionen. Das Elektron im Wasserstoffatom erfährt das rotationssymmetrische Coulombpotential

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad (2)$$

mit $Z = 1$. Betrachten wir Atome mit höheren Ordnungszahlen $Z > 1$, so führen die zusätzlich nötigen Elektronen zu Wechselwirkungseffekten, die den Hamiltonian verkomplizieren. Ein wasserstoffartiges Ion besteht aus einem Atomkern mit $Z > 1$, jedoch nur einem Elektron. Dadurch erfährt das Elektron in guter Näherung ausschliesslich das Coulombpotential (2) mit einer Modifikation von Z verglichen mit dem Wasserstoffatom.

Infolgedessen sind die Eigenwerte dieser Ionen analog zu berechnen wie die für das Wasserstoffatom selbst.

Aufgrund der Rotationssymmetrie des Potentials (2) kann das stationäre Problem mit Hilfe eines Separationsansatzes $\psi(r, \Theta, \Phi) = (U(r)/r)Y(\Theta, \Phi)$ gelöst werden. Dies führt zu den Eigenenergien

$$E_n = -\frac{1}{2}mc^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}, \quad (3)$$

mit der Quantenzahl $n = n_r + \ell + 1$, einer Summe aus der radialen Quantenzahl n_r und Drehimpulsquantenzahl ℓ , sowie der Feinstrukturkonstante $\alpha = e^2/(\hbar c)$.

- (b) Zeigen Sie unter Zuhilfenahme des Separationsansatzes, dass die stationäre Schrödingergleichung in sphärischen Koordinaten zu folgender Differentialgleichung für $U(r)$ führt:

$$\frac{d^2}{dr^2}U(r) + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2Ze^2m}{\hbar^2} \frac{1}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] U(r) = 0. \quad (4)$$

Nutzen Sie bei der Herleitung $A\ell(\ell+1)$ als Konstante der entstehenden separierten Gleichungen, wobei A der konstante Vorfaktor der zweiten radialen Ableitung ist.

- (c) Da sich das System separieren lässt, kann das Problem effektiv eindimensional beschrieben werden mit der Differentialgleichung (4). Diese Differentialgleichung ist von der Form her identisch einer eindimensionalen Schrödingergleichung. In was für einem effektiven Potential bewegt sich das Elektron in dieser? Welche Form besitzt der effektive eindimensionale Hamiltonian \hat{H}_{eff} ? Welche Bedeutung hat der zusätzliche Term?
- (d) Die Eigenenergien von (4) sind gegeben durch (3). Das Elektron befinde sich in einem Eigenzustand des Hamiltonians \hat{H} . Für Erwartungswerte von radialen Größen ist es ausreichend das effektive eindimensionale Problem zu betrachten.

Nutzen Sie das Feynman-Hellmann Theorem sowie das effektive System um die folgenden Erwartungswerte zu bestimmen:

$$\left\langle \frac{1}{r^m} \right\rangle, \quad \text{für } m = 1, 2, 3 \quad (5)$$

Hinweis: Nutzen Sie für $m = 3$ dass die Eigenzustände des (effektiven) Systems stabil sind, im Mittel ist die Kraft erzeugt durch das Potential 0.

Die Ergebnisse von (d) werden wir demnächst nutzen um die Feinstruktur der wasserstoffartigen Ionen mittels Störungsrechnung zu erhalten.

Aufgabe 2: Teilchen im sphärischen Potentialtopf

In dieser Aufgabe sollen die Energieeigenwerte der gebundenen Zustände eines Teilchens in einem sphärischen Potentialtopf der Form

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{für } r \leq a \\ 0 & \text{für } r > a \end{cases} \quad (6)$$

bestimmt werden, wobei $a > 0$ ist.

- (a) Zeigen Sie zunächst mittels eines Separationsansatzes, dass die radiale Schrödinger-Gleichung die Form

$$\frac{d^2}{dr^2}U(r) + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} + V_{\text{eff}}^l(r) \right] U(r) = 0 \quad (7)$$

annimmt, bestimmen Sie $V_{\text{eff}}^l(r)$ und skizzieren Sie es. Bestimmen Sie den minimalen Wert von V_0 für welchen noch gebundene Zustände existieren können.

- (b) Lösen Sie (7) jeweils separat für $r \leq a$ und für $r > a$. Überführen Sie diese dazu jeweils in eine sphärische Bessel'sche Differentialgleichung und lösen Sie diese unter Berücksichtigung dessen, dass die Wellenfunktion beschränkt und normierbar bleiben muss.

(c) Die Lösung aus dem letzten Aufgabenteil ist gegeben durch

$$U_{kl}(r) = \begin{cases} Arj_l(kr) & \text{für } r \leq a \\ Brh_l^1(i\chi r) & r > a \end{cases} \quad (8)$$

wobei $A, B \in \mathbb{C}$ zunächst beliebige Koeffizienten, $k = \sqrt{2m(E + V_0)/\hbar^2}$, $\chi = i\sqrt{2mE/\hbar^2}$, $j_l(x)$ die sphärische Besselfunktionen und $h_l^1(x)$ die sphärischen Hankelfunktionen erster Art sind. Ermitteln Sie mit Hilfe der Forderung nach Stetigkeit der Wellenfunktion und ihrer Ableitung transzendente Gleichung in k für den Fall $l = 0$. Ermitteln Sie graphisch unter welcher Bedingung eine Lösung existiert.

Aufgabe 3: Molekülmodell

(10 Punkte)

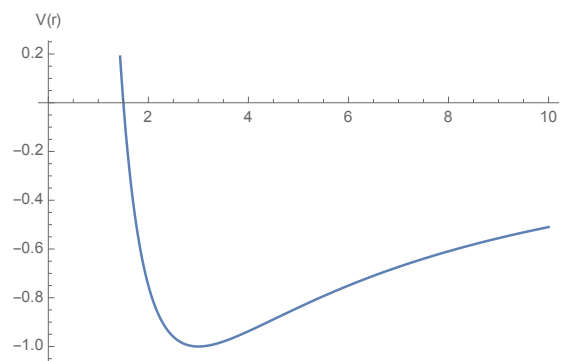


Abbildung 1: Aufgabe 3: Effektives Molekülpotential

Einige zweiatomige Moleküle können über das folgende Potential effektiv beschrieben werden

$$V(r) = -2D \left(\frac{a}{r} - \frac{a^2}{2r^2} \right) \quad (9)$$

r beschreibt hier den Abstand der Atome voneinander, D und a bestimmen die Stärke und Position des Potentials an seinem Minimum (siehe Abb. 1).

- Führen Sie die folgende Variablensubstitutionen durch $\rho = \frac{r}{a}$, $\kappa^2 = -\frac{2ma^2}{\hbar^2}E$ und $\gamma^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2}D$ um die zugehörige radiale Schrödingergleichung zu vereinfachen. Vergleichen Sie diese mit der radialen Schrödingergleichung (siehe Gl. (4)) des Wasserstoffatoms.
- Vergleichen Sie die Koeffizienten beider Gleichungen und bestimmen Sie so die Energieniveaus $E_{n,l}$ des Molekülmodells.
- Wir wollen nun die Energien im Grenzfall starker Potentiale $D \gg \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ betrachten. Dies entspricht $\gamma \gg 1$. Entwickeln Sie die Energien bis in zweiter Ordnung und interpretieren Sie die auftretenden Terme physikalisch. *Hinweis: Die folgenden Näherung sind hierbei nützlich:*
 $\sqrt{1+x^2} \approx 1 + \frac{x^2}{2}$, $\left[\frac{1}{1+ax+bx^2} \right]^2 \approx [1 - ax + (a^2 - b)x^2]^2 \approx 1 - 2ax + (3a^2 - 2b)x^2$