Quantenmechanik I SS 11

PROF. U. NIERSTE
DR. M. WIEBUSCH

Übungsblatt 12
Abgabe 08.07.2011
Besprechung 13.07.2011

Name: _____ Matrikel-Nr: _____ Gruppe: _____
(Bitte Ausfüllen und an die Lösung heften.)

Aufgabe 22: Zweiatomige Moleküle

(10 Punkte)

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.

- 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. (1 Punkt)
- 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? Skizzieren Sie diese Niveaus. (2 Punkte)
- 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. (4 Punkte)

- 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).

(3 Punkte)

Aufgabe 23: Stark Effekt

(10 Punkte)

Betrachten sie ein Wasserstoffatom in einem konstanten elektrischen Feld $\mathcal{E}$, welches entlang der z -Achse orientiert ist, d.h. $\mathcal{E} = \mathcal{E}e_3$. 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?

(2 Punkte)

- b) Betrachten Sie das $n = 1$ Niveau. Drücken Sie die Polarisierbarkeit α durch Matrixelemente von W_S zwischen Wasserstoff Zuständen aus. Die Polarisierbarkeit ist definiert durch $d = \alpha\mathcal{E}$, wobei d der durch das angelegte elektrische Feld $\mathcal{E}$ induzierte elektrische Dipol ist. Zeigen Sie, dass $d = \partial\Delta E_1/\partial\mathcal{E}$ 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.

(2 Punkte)

- 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.

(6 Punkte)