Jak dotąd na zajęciach bezwzględnie zakładaliśmy przybliżenie nierelatywistyczne ufając, że wielkość efektów relatywistycznych jest dla nas nieistotna. Sprawdź, jak wygląda to w przypadku stanu podstawowego atomu wodoru. W tym celu posłuż się rachunkiem zaburzeń: jako hamiltonian niezaburzony weź znany nam już dobrze nierelatywistyczny hamiltonian atomu wodoru z nieruchomym jądrem, jako funkcję niezaburzoną – znormalizowaną funkcję falową stanu podstawowego ($\psi_0^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r}$), zaś zaburzenie opisywać będzie efekty relatywistyczne ($\hat{H}^{(1)} = \hat{H}_{kin} + \hat{H}_{Darwin}$). Oblicz poprawkę pierwszego rzędu do energii.

W praktyce uwzględnić trzeba dwa efekty:

- Relatywistyczną poprawkę do energii kinetycznej: $\hat{H}_{kin} = -\frac{\hat{p}^4}{8m_e^3c^2}$, gdzie: $\hat{p} = -i\nabla_e$ – operator pędu, $m_e = 1[a.u.]$ – masa elektronu, $c = 137.[a.u]$ – szybkość światła w próżni.
- Poprawkę Darwina[1] (która modyfikuje energię potencjalną oddziaływania elektron-jądro): $\hat{H}_{Darwin} = \frac{Ze^2\pi}{2m_e^2c^2}\delta^3(\vec{r})$, gdzie $Z = 1$ – ładunek jądra, $c = 137.[a.u]$ – szybkość światła w prózni, $m_e = 1[a.u.]$ – masa elektronu, $e = 1[a.u.]$ – ładunek elektonu.

[1] Co ciekawe, wyprowadzoną przez Karola Darwina – wnuka słynnego Karola Darwina od teorii ewolucji.

Kilka wskazówek:

1. Operator $\hat{p}^4$ można rozbić na iloczyn $\hat{p}^2\hat{p}^2$.
2. Operator kwadratu pędu jest operatorem hermitowskim – zatem jednym $\hat{p}^2$ można zadziałać na bra (w lewo), drugim na ket (w prawo).
3. Można też skorzystać z faktu, że $E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle = (\frac{\hat{p}^2}{2m_e} - \frac{1}{r}) |\psi_n^{(0)}\rangle$.
4. Czyli da się sprowadzić problem do całek, które już kiedyś liczyliśmy!
5. Symbol $\delta^3(\vec{r})$ oznacza 3-wymiarową deltę Diraca. Ma ona tę samą pożyteczną własność, co delta 1-wymiarowa, jeśli chodzi o całkowanie funkcji – całka z deltą Diraca sprowadza się do wartości funkcji stojącej wraz z deltą pod całką w punkcie $\vec{r}_x$: $\int d^3r \; f(\vec{r})\delta^3(\vec{r} - \vec{r}_x) = f(\vec{r}_x)$.

Jak ma się rząd wielkości wyniku do poprawek związanych z ruchem jądra i jego niezerowym rozmiarem (liczyliśmy na zajęciach)? Czy, analizując swoje obliczenia i korzystając ze swojej wiedzy nt. kwantowomechanicznego opisu atomu wodoru, jesteś w stanie powiedzieć, dlaczego poprawka Darwina jest niezerowa jedynie dla stanów o symetrii s?