Theoretische Physik 5
Höhere Quantenmechanik
Wintersemester 2018/2019
Übungsblatt 3

Dozent: Prof. Dr. Pedro Schwaller — Abgabe: 12.11.2018
Assistent: Eric Madge — 30 Punkte

Sie finden die Übungsblätter online unter `http://www.staff.uni-mainz.de/pschwal/index_1819.html`.
Abgabe bis Montag 12.11.2018 (12:30) im roten Briefkasten 42 (Foyer im Staudingerweg 7).

1. **Elektronen in einem endlichen Volumen** **(15 Punkte)**

   In dieser Aufgabe sollen die Beiträge zum Hamilton-Operator eines in einem endlichen kubischen Volumen mit Seitenlänge L eingeschlossenen Gases von N Elektronen in der Besetzungszahldarstellung untersucht werden. Als Basiszustände können die auf das Volumen L^3 normierten ebenen Wellen $|\vec{k}\rangle$ mit

   $$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \langle \vec{x}|\vec{k}\rangle = \frac{1}{L^{3/2}} \exp\left(i\ \vec{k}\cdot\vec{x}\right)$$

   zu quantisierten Impulsen $\vec{p} = \hbar\vec{k} = \frac{2\pi\hbar\vec{\nu}}{L}$, $\vec{\nu} \in \mathbb{Z}^3$ verwendet werden. Die zugehörigen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren seien mit $\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}$ und $\hat{a}_{\vec{k}}$ bezeichnet, insbesondere gilt $\{\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'}\} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'}$. Der Spinfreiheitsgrad wird nicht berücksichtigt.

   (a) **(3 Punkte)** Zeigen Sie, dass

   $$\hat{\phi}(\vec{x}) = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\,\hat{a}_{\vec{k}}\ .$$

   (b) **(5 Punkte)** In der Ortsdarstellung ist der Operator ‘kinetische Energie’ des Elektrongases $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^N \Delta_{\vec{x}_i}$. Zeigen Sie, dass der entsprechende Operator in der Besetzungszahldarstellung in der folgenden Form geschrieben werden kann:

   $$\hat{T} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\vec{k}}\hat{a}_{\vec{k}}\,.$$

   (c) **(7 Punkte)** Die Wechselwirkung der Elektronen untereinander hängt nur vom Abstand $|\vec{x}_i - \vec{x}_j|$ ab und ist in der Ortsdarstellung gegeben durch

   $$\hat{V} = \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^{N} V(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|)\,.$$

Leiten Sie die folgende in der Besetzungszahldarstellung gültige Form her:

$$\hat{V} = \frac{1}{2L^3} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}} \tilde{V}(\vec{q})\, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}+\vec{q}}\, \hat{a}^\dagger_{\vec{k}'-\vec{q}}\, \hat{a}_{\vec{k}'}\, \hat{a}_{\vec{k}}\,, \qquad \tilde{V}(\vec{q}) \equiv \int_{L^3} \mathrm{d}^3x\, V(|\vec{x}|) e^{-i\,\vec{q}\cdot\vec{x}}\,.$$

2. **Para-Helium** **(15 Punkte)**

In dieser Aufgabe betrachten wir die Grundzustandsenergie des Elektronenpaares in einem Helium-Atom mit unendlich schwerem Kern. Der entsprechende Zwei-Elektronen-Hamiltonoperator ist gegeben durch $H = H_0 + \Delta H$ mit

$$H_0 = \frac{(\vec{p}_1)^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{(\vec{p}_2)^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_2}\,, \qquad \Delta H = \frac{e^2}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}\,, \quad r_i = |\vec{x}_i| \text{ für } i = 1, 2\,.$$

Zustände, in denen die Spins der Elektronen anti-parallel ausgerichtet sind ($S = 0$, Spinsingulett) werden als Para-Helium bezeichnet. Bei paralleler Ausrichtung ($S = 1$, Spintriplett) spricht man von Ortho-Helium.

(a) **(13 Punkte)** Berechnen Sie die Korrektur zur Grundzustandsenergie von Para-Helium in erster Ordnung Störungstheorie bezüglich der Störung ΔH. Alle auftretenden Integrale sind von Hand zu lösen.

(b) **(2 Punkte)** Berechnen Sie den numerischen Wert der Korrektur.

Hinweise:

Die normierte Ortswellenfunktion des Grundzustandes für das Ein-Elektron-Atom mit unendlich schwerem Kern mit Kernladungszahl Z und Hamiltonoperator

$$H^{(1)} = \frac{(\vec{p})^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \qquad r = |\vec{x}|$$

lautet

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_B}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_B}\right)\,,$$

wobei a_B der Bohrsche Radius ist. Nutzen Sie zur Auswertung der auftretenden Integrale die Multipolentwicklung der Abstandsfunktion

$$\begin{aligned}\frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} &= \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos(\alpha)}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} P_l(\cos\alpha) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\theta_1, \phi_1) Y_{lm}(\theta_2, \phi_2)\end{aligned}$$

mit $r_< = \min(r_1, r_2)$ und $r_> = \max(r_1, r_2)$ sowie die Orthogonalitätsrelation der Kugelfächenfunktionen

$$\int \mathrm{d}\Omega\, Y^*_{l'm'}(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) = \delta_{l'l}\delta_{m'm}\,.$$

Zur Lösung auftretender Integrale ist es hilfreich,

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

in Kombination mit der obigen Orthogonalitätsrelation anzuwenden.