

Übungen zur Vorlesung Quantenmechanik

Blatt 13

Quicky:

120. Erklären Sie Ursprung und Wirkung der Austauschwechselwirkung im Wasserstoffmolekül.
121. Erklären Sie Ursprung und Wirkungsweise der chemischen Bindung im Wasserstoffmolekül.
122. Erklären Sie die Grundidee des Variationsverfahrens zur näherungsweise Lösung eines quantenmechanischen Problems.
123. Erklären Sie die Grundidee der stationären Störungsrechnung. Unter welchen Umständen kommt sie als Lösungsmethode in Frage?
124. Wie lautet der Ausdruck für die Verschiebung der Energieniveaus in erster Ordnung Störungsrechnung?
125. Welches Problem tritt bei der Anwendung dieses Ausdrucks auf, wenn die Energieniveaus des ungestörten Systems entartet sind? Skizzieren Sie den Ansatz zur Lösung dieses Problems.

Aufgaben (abzugeben bis 1. Februar vor 8:15 Uhr)

Abgabe: Einwurf in den roten Kasten Nr. 34 im Erdgeschoss des Physik-Gebäude

Aufgabe 40) Anharmonischer Oszillator (10 Punkte)

Betrachten Sie einen anharmonischen eindimensionalen Oszillator mit dem Hamiltonoperator

$$H = H_0 + V(x) \quad \text{mit} \quad H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 \quad \text{und} \quad V(x) = \sigma \hbar\omega_0 \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} x\right)^3$$

- (a) Fassen Sie $V(x)$ als Störung auf und berechnen Sie die Energieverschiebung der Energieniveaus verglichen in erster Ordnung Störungstheorie.
- (b) Berechnen Sie die Korrekturen zu den Eigenvektoren $|n\rangle$ in erster Ordnung Störungsrechnung.
- (c) Berechnen Sie mit Hilfe von (b) die Verschiebung der Energiekorrektur in zweiter Ordnung Störungstheorie.

Aufgabe 41) Störungsrechnung für das 1s-Elektron (10 Punkte)

- (a) Gegeben sei ein wasserstoffähnliches Atom mit Kernladungszahl Z , in dem sich ein 1s-Elektron befinde. Berechnen Sie die Änderung der Energie bei Erhöhung der Kernladungszahl um 1 mit Hilfe der Störungstheorie 1. Ordnung und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem exakten Resultat. Erinnerung: Die 1s-Wellenfunktion lautet $\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\gamma^{3/2}e^{-\gamma r}$, $\gamma = \frac{me^2}{\hbar^2}Z$.
- (b) Beschreibt man den Atomkern als homogen geladene Kugel vom Radius R_0 , so kann der Einfluß der endlichen Kernaushdehnung auf die Energieniveaus des Wasserstoffatoms bzw. eines wasserstoffähnlichen Ions durch das wellenmechanische Störpotential

$$W(r) = \begin{cases} \frac{Ze^2}{R_0} \left(\frac{R_0}{r} - \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \frac{r^2}{2R_0^2} \right) & \text{für } r < R_0 \\ 0 & \text{für } r > R_0 \end{cases}$$

approximiert werden. Bestimmen Sie die störungstheoretische Energiekorrektur des 1s-Niveaus. Im Bereich der Störung kann die Wellenfunktion als konstant angesehen werden.

Aufgabe 42) Variationsverfahren (10 Punkte)

In Aufgabe 39) haben Sie die Grundzustandsenergie des Heliumatoms abgeschätzt, indem Sie ausgehend von dem Hamiltonoperator

$$H = H_1 + H_2 + V_{12} \quad \text{mit} \quad H_i = \frac{\vec{p}_i^2}{2m} - Ze^2/r_i, \quad V_{12} = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

(mit der Kernladungszahl $Z = 2$) die Verschiebung $\Delta E \approx \langle 0|V_{12}|0 \rangle$ der Grundzustandsenergie gegenüber einem Referenzsystem mit $V_{12} = 0$ ausgerechnet haben. Hier war $|0 \rangle$ der Grundzustandsvektor in dem Referenzsystem und die zugehörige Wellenfunktion war $\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \propto \exp[-Z(r_1 + r_2)/a_0]$ (wobei $a_0 = \hbar^2/me^2$). Wie Sie mittlerweile wissen, entspricht dieser Ansatz einer Störungstheorie erster Ordnung.

In dieser Aufgabe sollen Sie die Abschätzung nun über ein Variationsverfahren noch weiter verbessern. Machen Sie dazu den Variationsansatz

$$\psi_{\text{var}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \propto \exp[-Z_{\text{eff}}(r_1 + r_2)/a_0]$$

- (a) Berechnen Sie zunächst die Größe $J_i(Z_{\text{eff}}) := \langle \psi_{\text{var}} | H_i | \psi_{\text{var}} \rangle / \langle \psi_{\text{var}} | \psi_{\text{var}} \rangle$ als Funktion von Z_{eff} . Zeigen Sie, dass $J_i(Z_{\text{eff}})$ wie erwartet bei $Z_{\text{eff}} = Z$ minimal wird.
- (b) Berechnen Sie nun $J_{12}(Z_{\text{eff}}) := \langle \psi_{\text{var}} | V_{12} | \psi_{\text{var}} \rangle / \langle \psi_{\text{var}} | \psi_{\text{var}} \rangle$.
Sie erhalten $J_{12}(Z_{\text{eff}}) = \frac{5}{8} \frac{e^2}{a_0} Z_{\text{eff}}$.
- (c) Betrachten Sie schließlich $J(Z_{\text{eff}}) := \langle \psi_{\text{var}} | H | \psi_{\text{var}} \rangle / \langle \psi_{\text{var}} | \psi_{\text{var}} \rangle$ und minimieren Sie diese Größe bezüglich Z_{eff} .

Die Variable Z_{eff} kann man auch als effektive Kernladungszahl auffassen. Welchen Wert erhalten Sie?

Der Wert von $J(Z_{\text{eff}})$ am Minimum ist Ihre neue Abschätzung der Grundzustandsenergie. Vergleichen Sie ihn mit der Abschätzung aus Aufgabe 39) und zeigen Sie, dass er tatsächlich niedriger ist.