Übungen zur Quantentheorie (WS 2013/14)

Prof. Dr. G. Münster

Übungsblatt 9 **Abgabe: 07.01.2014**

Aufgabe 26: Energiekorrekturen in angeregtem Helium (3 Punkte)

Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in angeregtem Helium ist störungstheoretisch erfassbar. Für Singulett- und Triplett-Zustände ergaben sich die Energiekorrekturen zu

$$\Delta E_{1n} \;=\; K_{nl} \pm A_{nl}.$$

Dabei resultiert K_{nl} aus der elektrostatischen Wechselwirkung der Elektronen und die Austauschenergie A_{nl} ist eine Konsequenz der Antisymmetrisierung der Wellenfunktion. Überlegen Sie, dass sich die Korrektur auch in der Form

$$\Delta E_{1n} = K_{nl} - \frac{1}{2}(1 + \langle \vec{\sigma}^{(1)} \cdot \vec{\sigma}^{(2)} \rangle) A_{nl}$$

schreiben lässt. $\vec{\sigma}^{(1)}$ und $\vec{\sigma}^{(2)}$ sind die Pauli-Operatoren der ungekoppelten Elektronenspins, und der Erwartungswert $\langle \cdots \rangle$ ist in dem jeweils betrachteten Zustand zu bilden.

Hinweis: Es gilt $\quad 2\,\vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} = \left(\vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}\right)^2 - \frac{3}{2}\hbar^2\,.$

Aufgabe 27: Grundzustandsenergie von Wasserstoffatomen (5 Punkte)

Finden Sie mit dem Ritz'schen Variationsverfahren eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie eines Wasserstoffatoms ($V(r) = -\frac{\gamma}{r}$). Verwenden Sie dazu die Testfunktion

$$\psi(r) = A(a + r)^{-\nu}\,,$$

wobei a und ν Variationsparameter darstellen. Damit die Wellenfunktion normierbar ist, gilt die Einschränkung $\nu > 1$. Vergleichen Sie das Ergebnis mit dem tatsächlichen Wert für die Grundzustandsenergie.

Hinweis: Berechnen Sie zuerst den Normierungsfaktor A. Beachten Sie, dass der Beitrag der kinetischen Energie gegeben ist durch $\frac{1}{2m}\langle\psi|P_r^2|\psi\rangle$, wobei P_r der Radialimpuls-Operator $\left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right]$ ist.

Aufgabe 28: Zwei Teilchen im Potentialtopf (5 Punkte + 2 Bonuspunkte)

Zwei nicht-wechselwirkende Teilchen mit der Masse m befinden sich in einem eindimensionalen unendlich hohen Potentialtopf der Breite L.

a) Was sind die vier niedrigsten Energien dieses Systems?

b) Wie sind die Entartungsgrade dieser Energien, wenn die zwei Teilchen

   (1) identisch mit Spin $\frac{1}{2}$,

   (2) nicht identisch mit jeweils Spin $\frac{1}{2}$,

   (3) **(als Bonusaufgabe)** identisch mit Spin 1

   sind?