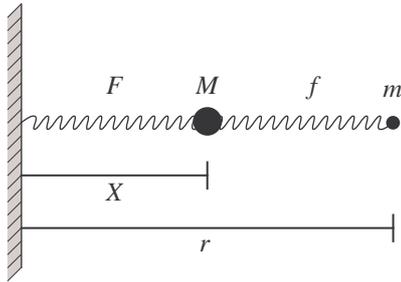


**Aufgabe 1: Dynamik zweier gekoppelter Massen**

**(4 Punkte)**

Gegeben sei die Hamiltonfunktion zweier Teilchen in einer Dimension:



$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} F X^2 + \frac{1}{2} f (X - r)^2$$

- a) Berechnen Sie klassisch die Frequenzen der Eigenschwingungen des Systems.
- b) Geben Sie den Hamiltonoperator und die Eigenwerte des entsprechenden quantenmechanischen Systems an.
- c) Die Masse  $m$  sei viel kleiner als die Masse  $M$ . Berechnen Sie die Eigenwerte von  $\hat{H}$  analog zur Born-Oppenheimer-Näherung. Vernachlässigen Sie dazu im ersten Schritt die Bewegung der schweren Masse  $M$  und geben Sie die Eigenwerte des entsprechenden Hamiltonoperators an. Lösen Sie dann das Problem der Bewegung der schweren Masse  $M$  im gerade berechneten „effektiven Potential“.

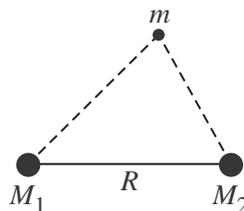
- d) Vergleichen Sie die Ergebnisse aus b) und c). Benutzen Sie dabei die Abkürzungen  $\omega = \sqrt{\frac{f}{m}}$ ,  $\Omega = \sqrt{\frac{F}{M}}$  und  $\kappa = \sqrt[4]{\frac{m}{M}}$ .

**Aufgabe 2:  $H_2^+$ -Molekül: Berechnung der elektronischen Energie durch Variationsrechnung**

**(6 Punkte)**

Das  $H_2^+$ -Molekül besteht aus 2 Protonen (Orte  $\vec{R}_1$  bzw.  $\vec{R}_2$ ) und einem Elektron (Ort  $\vec{r}$ ). Die zugehörige Schrödingergleichung lautet:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2M_1} \Delta_{\vec{R}_1} - \frac{\hbar^2}{2M_2} \Delta_{\vec{R}_2} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|} - \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_1|} - \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_2|} \right) \right) \psi(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{r}) = E \psi(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{r})$$



Im Rahmen der Born-Oppenheimer-Näherung wird der Abstand der Protonen  $R = |\vec{R}_1 - \vec{R}_2|$  festgehalten und zunächst die elektronische Energie für festes  $R$  berechnet. In atomaren Einheiten (Rydberg und a. u.) lautet dann die zu lösende Schrödingergleichung:

$$\hat{H}_o \phi_\alpha(\vec{r}; \vec{R}_1, \vec{R}_2) = E_\alpha^{el} \phi_\alpha(\vec{r}; \vec{R}_1, \vec{R}_2)$$

mit:

$$\hat{H}_o = -\Delta_{\vec{r}} - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{R}_1|} - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{R}_2|} + \frac{2}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|}.$$

Diese Gleichung ist mittels elliptischer Koordinaten separierbar und exakt lösbar. Wir wollen hier jedoch die Energieeigenwerte näherungsweise im Rahmen einer Variationsrechnung bestimmen. Als Ansatzfunktion wählen wir eine Linearkombination aus Wasserstoff 1s-Funktionen:

$$\tilde{\phi}(\vec{r}) = c_1 \varphi_1(\vec{r}) + c_2 \varphi_2(\vec{r})$$

mit:

$$\varphi_1(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \gamma^{\frac{3}{2}} e^{-\gamma|\vec{r} - \vec{R}_1|} \quad \text{und} \quad \varphi_2(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \gamma^{\frac{3}{2}} e^{-\gamma|\vec{r} - \vec{R}_2|}.$$

Aus Symmetriegründen muss  $c_1 = \pm c_2$  sein. Daher ergeben sich zwei Ansatzfunktionen, die wir mit  $\phi_{\pm}$  bezeichnen wollen.

- a) Berechnen Sie mit den beiden Ansatzfunktionen nach dem Variationsprinzip die Energie des Grundzustandes und des 1. angeregten Zustandes mittels:

$$\tilde{E}_{\pm}(\gamma) = \frac{\langle \tilde{\phi}_{\pm} | \hat{H}_o | \tilde{\phi}_{\pm} \rangle}{\langle \tilde{\phi}_{\pm} | \tilde{\phi}_{\pm} \rangle}.$$

- b) Diskutieren Sie den Fall  $\gamma = 1$ . Zeichnen Sie  $E_{\pm}(\gamma = 1)$  als Funktion von  $R$ . Bei welchem Abstand  $R_0$  ist die Energie minimal? Wie groß ist dann die elektronische Grundzustandsenergie?
- c) Für alle, die noch nicht genug haben: Um im Rahmen dieses Ansatzes die Kurve der Grundzustandsenergie  $\tilde{E}(R)$  zu erhalten, muss man für jedes gewählte  $R$  die Variationsenergie  $\tilde{E}_{\pm}(\gamma)$  bezüglich  $\gamma$  minimalisieren. Führen Sie das durch und vergleichen Sie  $\tilde{E}(R)$  mit der Kurve aus Teil b).

### Hilfsintegrale:

$$I_1 = \int \varphi_1(\vec{r}) \Delta_{\vec{r}} \varphi_1(\vec{r}) d^3 r = -\gamma^2$$

$$I_2 = \int \varphi_1(\vec{r}) \Delta_{\vec{r}} \varphi_2(\vec{r}) d^3 r = \gamma^2 e^{-\gamma R} \left( \frac{(\gamma R)^2}{3} - \gamma R - 1 \right)$$

$$I_3 = \int \varphi_1(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_1|} \varphi_1(\vec{r}) d^3 r = \gamma$$

$$I_4 = \int \varphi_1(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_2|} \varphi_1(\vec{r}) d^3 r = -\gamma e^{-2\gamma R} \left( 1 + \frac{1}{\gamma R} \right) + \frac{1}{R}$$

$$I_5 = \int \varphi_1(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_1|} \varphi_2(\vec{r}) d^3 r = \int \varphi_1(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_2|} \varphi_2(\vec{r}) d^3 r = \gamma(1 + \gamma R) e^{-\gamma R}$$

$$I_6 = \int \varphi_1(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}) d^3 r = S = e^{-\gamma R} \left( \frac{(\gamma R)^2}{3} + \gamma R + 1 \right)$$

Alle anderen Integrale ergeben sich mit Hilfe von Symmetrieargumenten!