

Theoretische Physik III - Quantenmechanik (SoSe 2015) -

Übungsblatt 09 (24 Punkte)

Ausgabe 22.06.15 – Abgabe 29.06.15 – Besprechung n.V.

▷ **Aufgabe 1** [Ritz'sches Theorem] (3 Punkte)

Beweisen Sie das Ritz'sche Theorem wonach das Funktional $E[\psi] = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ genau dann stationär, $\delta E[\psi] = 0$, wenn $\psi = \psi_0$ Eigenvektor von \hat{H} , etwa $\hat{H}\psi_0 = E_0\psi_0$. Schließen Sie aus diesem Theorem $E[\psi] \geq E_0$, wobei E_0 die Grundzustandsenergie. Stöbern Sie im Lehrbuch und geben eine Anwendung an.

▷ **Aufgabe 2 (Grundzustandsenergie mittels Ritz)*** (4 Punkte)

Schätzen Sie mittels Ritz'schem Theorem die Grundzustandsenergie eines Elektrons im Coulombfeld des Z -fach geladenen Kern ab. Benutzen Sie als Variationsansatz $\propto e^{-\kappa r}$ mit κ Variationsparameter. Wie vergleicht sich Ihr Ergebnis mit dem exakten Wert?

▷ **Aufgabe 3 (Anharmonischer Oszillator)*** (4 Punkte)

Gegeben der anharmonische Oszillator,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2 + \frac{1}{4!}\tilde{g}\hat{q}^4 \quad (1)$$

worin \tilde{g} "kleiner" Parameter.

- Bestimmen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren von \hat{H} in führender Ordnung Störungstheorie. (3 Punkte)
- Schätzen Sie die Korrekturen zur nächsten Ordnung jenseits der führenden Ordnung ab. (2 Punkte)
- Für welche Parameterwerte \tilde{g} darf die Anharmonizität $\propto \hat{q}^4$ als "kleine Störung" behandelt werden? (1 Punkt)

Hinweis: Es empfiehlt sich, erst einmal alles auf Harmonische Oszillator Leiteroperatoren umzuschreiben.

▷ **Aufgabe 4 (H_2^+ -Molekül)** (5 Punkte)

Das einfachste Molekül der Welt ist das einfach ionisierte Wasserstoff-Molekül H_2^+ . In der Born-Oppenheimer Näherung nimmt man an, dass sich die beiden Protonen in einem festen Abstand R voneinander befinden. Ordnet man das Elektron einem der beiden Protonen zu – etwa Proton 1 – und vernachlässigt die Coulombwechselwirkung mit dem jeweils anderen Proton – im Beispiel wäre das Proton 2 – so wäre der Grundzustand ψ_1 eine am Ort des Proton 1 lokalisierte Exponentialfunktion. Allerdings hat der Zustand ψ_2 (eine am Ort

des Protons 2 lokalisierte Exponentialfunktion) die gleiche Energie (nämlich welche?) – der “ungestörte” Grundzustand ist entartet.

Die “Störung” – im vorliegenden Fall die Coulombwechselwirkung mit dem jeweils anderen Proton – hebt diese zweifache Entartung auf. Ihre Aufgabe ist es, die Energieaufspaltung als Funktion des Abstandes der beiden Protonen zu berechnen und sich davon zu überzeugen, dass im Falle einer geraden Kombination $\propto \psi_1 + \psi_2$ ein gebundener Zustand bei einem gewissen R_0 möglich ist, nicht aber für die ungerade Kombination $\propto \psi_1 - \psi_2$.

Von der Fein- und Hyperfeinwechselwirkung dürfen Sie in dieser Aufgabe getrost absehen. Die Feinstruktur war ja offiziell “noch nicht dran” und die Hyperfeinstruktur bearbeiten Sie weiter unten

▷ **Aufgabe 5 (Addition von Bahndrehimpuls und Spin- $\frac{1}{2}$)** (8 Punkte)

[Klausurelevant? Nicht in dieser Form – aber die Kopplung $\ell = 1$ an $s = 1/2$ könnte durchaus “dran” kommen . . .]

Wird beim Wasserstoffproblem auch der Spin der Elektrons berücksichtigt ist mit

$$\hat{j} := \hat{l} + \hat{s} \tag{2}$$

der Gesamtdrehimpuls des Elektrons verabredet.

Gemeinsame Eigenzustände zu \hat{j}^2 , \hat{j}_z , \hat{l}^2 und \hat{s}^2 werden notiert $|jm_jls\rangle$, wenn nötig Komma zwischen den Einträgen, worin Quantenzahlen j, m_j, ℓ und s definitiosgemäß

$$\begin{aligned} \hat{j}^2|jm_jls\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|jm_jls\rangle, & \hat{j}_z|jm_jls\rangle &= \hbar m_j|jm_jls\rangle, \\ \hat{l}^2|jm_jls\rangle &= \hbar^2 \ell(\ell+1)|jm_jls\rangle, & \hat{s}^2|jm_jls\rangle &= \hbar^2 s(s+1)|jm_jls\rangle, \end{aligned} \tag{3}$$

Der Wert von s liegt natürlich fest, $s = \frac{1}{2}$, der Wertebereich von ℓ ist variabel $\ell = 0, 1, 2, \dots$. Zu jedem ℓ (mit Ausnahme $\ell = 0$) gibt es zwei mögliche Werte $j = \ell \pm \frac{1}{2}$. Für $\ell = 0$ gibt es nur ein $j = \frac{1}{2}$.

Das Ziel ist es, die $|jm_jls\rangle$ durch eine Linearkombination der Produktzustände $|\ell m_\ell; s\mu\rangle := |\ell m_\ell\rangle \otimes |s\mu\rangle$ auszudrücken, wobei Quantenzahlen m_ℓ und μ definitionsgemäß $\hat{l}_z|\ell m_\ell s\mu\rangle = \hbar m_\ell|\ell m_\ell s\mu\rangle$, $m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$, und $\hat{s}_z|\ell m_\ell s\mu\rangle = \hbar \frac{\mu}{2}|\ell m_\ell s\mu\rangle$ mit $\mu = \pm 1$. In jedem Fall $m_j = -j, -j + 1, \dots, j$.

Zeigen Sie: Für $\ell = 1, 2, \dots$

$$|\ell \pm \frac{1}{2}, m_j; \ell, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} + m_j}{2\ell + 1}}|\ell, m_j \mp \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\pm\rangle \pm \sqrt{\frac{\ell + \frac{1}{2} - m_j}{2\ell + 1}}|\ell, m_j \pm \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}\mp\rangle \tag{4}$$

und für $\ell = 0$

$$|\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}; 0\frac{1}{2}\rangle = |0, 0\rangle \otimes |\frac{1}{2}\pm\rangle. \tag{5}$$

Spektroskopisch notiert man die m_j -Multipletts in der Form $n\ell_j$, etwa $2p_{\frac{1}{2}}$ oder $2p_{\frac{3}{2}}$. In der Grobstruktur (“Kepler-Atom”) sind diese beiden Niveaus anenergetisch entartet. Wird die Wechselwirkung des Spins mit dem Bahndrehimpuls in der Feinstruktur erfasst, wird diese Entartung aufgehoben.