Institut für Theoretische Physik | Universität Heidelberg
H. G. Dosch | Sommersemester 2001

10. Übung zur Quantenmechanik

Abgabe der Hausübungen: 11. Juli vor der Vorlesung
Besprechung der Präsenzübungen: 6. Juli

Informationen zur Nachklausur werden auf der Webseite
http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~ewerz/qmueb01.html
bekanntgegeben. Dort finden Sie auch noch einmal alle Übungsblätter, in denen die uns bekannten Druckfehler beseitigt sind.

P 37 Potentialtopf mit Störung (4 Punkte)

Wir wollen die eindimensionale Bewegung eines Teilchens der Masse m im Potential

$$V(x) = \begin{cases} \epsilon \cosh\left(\frac{\pi}{2a}x\right) & \text{für } |x| < a \\ \infty & \text{für } a \leq |x| \end{cases} \tag{1}$$

betrachten, wobei $a \in \mathbb{R}_+$ und $\epsilon \ll 1$. Das Potential $\epsilon \cosh[\pi x/(2a)]$ soll als Störung behandelt werden. Überzeugen Sie sich, daß die Eigenzustände des ungestörten Problems die Wellenfunktionen

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left[\frac{\pi}{2a}(n+1)x\right] & \text{für } n \text{ gerade} \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left[\frac{\pi}{2a}(n+1)x\right] & \text{für } n \text{ ungerade} \end{cases} \tag{2}$$

mit $n \in \mathbb{N}$ haben. Berechnen Sie die Energieverschiebung des Grundzustands in 1. Ordnung Störungstheorie. Bestimmen Sie die Zustände, die zum Grundzustand in 1. Ordnung beimischen.

Hinweis:

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \cosh(x) \cos^2(x) dx = \frac{4}{5} \sinh\left(\frac{\pi}{2}\right) \tag{3}$$

H 38 Kopplung von Spin und Bahndrehimpuls (optional) (+6 Punkte)

Der Hilbertraum für die Kopplung von Bahndrehimpuls und Spin wird aufgespannt durch die Produkte $\chi_\pm Y_l^m$ von Spinoren $\chi_\pm$ und Kugelflächenfunktionen Y_l^m. Für die Spinoren gilt

$$\vec{\mathbf{S}}^2 \chi_\pm = \frac{3}{4}\hbar^2 \chi_\pm \qquad \mathbf{S}_3 \chi_\pm = \pm\frac{\hbar}{2}\chi_\pm \,. \tag{4}$$

Der Gesamtdrehimpuls ist $\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}$.

(a) Zeigen Sie, daß die Produkte $\chi_\pm Y_l^m$ Eigenzustände zu $\mathbf{J}_3$ sind und geben Sie die Eigenwerte an.

(b) Geben Sie den Eigenzustand zu $\mathbf{J}_3$ mit dem minimal möglichen Eigenwert an. Zeigen Sie, daß dieser Zustand ein Eigenzustand zu $\vec{\mathbf{J}}^2$ ist und bestimmen Sie den Eigenwert.
Hinweis: Zeigen Sie erst

$$\vec{\mathbf{J}}^2 = \mathbf{J}_+\mathbf{J}_- + \mathbf{J}_3^2 - \hbar\mathbf{J}_3\,. \tag{5}$$

(c) Gewinnen Sie durch Anwendung eines geeigneten Operators aus dem in Teil (b) gefundenen Zustand einen Zustand mit demselben Eigenwert bezüglich $\vec{\mathbf{J}}^2$ und einem um $\hbar$ größeren Eigenwert zu $\mathbf{J}_3$.

(d) Finden Sie den dazu orthogonalen Zustand mit demselben Eigenwert zu $\mathbf{J}_3$. Ist dieser Zustand ein Eigenzustand zu $\vec{\mathbf{J}}^2$?

Hinweis:

$$\mathbf{L}_\pm Y_l^m = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}\,\hbar Y_l^{m\pm 1} \tag{6}$$

H 39 Helium-Atom (optional) (+6 Punkte)

Der Hamiltonoperator des Helium–Atoms ist

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^{(1)} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta^{(2)} - \frac{2e_0^2}{r^{(1)}} - \frac{2e_0^2}{r^{(2)}} + \frac{e_0^2}{|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|}\,, \tag{7}$$

wobei m die Elektronmasse und $-e_0$ die Ladung des Elektrons. Die Indizes in Klammern beziehen sich auf die beiden Elektronen, $r^{(1)} = \left|\vec{x}^{(1)}\right|$, $r^{(2)} = \left|\vec{x}^{(2)}\right|$. Der Hilbertraum dieses Problems wird im Ortsraum durch Zweiteilchen–Wellenfunktionen $\phi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$ aufgespannt. Aufgrund der Wechselwirkung der Elektronen (vgl. den letzten Term in Gl. (7)) kann dieses Problem nicht exakt gelöst werden. Wir wollen deshalb das Ritzsche Variationsverfahren anwenden, um die Grundzustandsenergie abzuschätzen.
Als einfache Testfunktion wollen wir das Produkt zweier Einteilchen–Wellenfunktionen ansetzen, die jeweils Eigenzustände des Coulombproblems beschreiben. Es erscheint physikalisch sinnvoll anzunehmen, daß das Feld des Kerns teilweise durch das jeweils andere Elektron abgeschirmt wird. Wir wollen dies in der Wahl der Testfunktion berücksichtigen, indem wir in den beiden Einteilchenfunktionen die Kernladung als freien Parameter wählen, den wir dann variieren. Wir setzen also an

$$\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = \psi_{100}^{Z_{\text{eff}}}(\vec{x}^{(1)})\psi_{100}^{Z_{\text{eff}}}(\vec{x}^{(2)}) \tag{8}$$

worin

$$\psi_{100}^{Z}(\vec{x}) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}}\,\exp\left(\frac{-Zr}{a_0}\right) \tag{9}$$

die normierte Grundzustandswellenfunktion für das Coulombproblem mit der Kernladung Z ist. (Beachten Sie, daß damit $\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$ auf 1 normiert ist.) Finden Sie eine optimale Abschätzung für die Grundzustandsenergie des Heliumatoms, indem Sie Z_{eff} variieren.

Hinweis:

$$\int d^3x^{(1)} d^3x^{(2)} \left|\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})\right|^2 \frac{e_0^2}{|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|} = \frac{5}{8} \frac{Z_{\text{eff}} e_0^2}{a_0} \tag{10}$$

Bemerkung: Der mit dem Ritzschen Variationsverfahren gewonnene Wert für die Grundzustandsenergie liegt um $2.7\,\text{eV}$ näher am experimentell gemessenen Wert ($E_0 = -78.8\,\text{eV}$) als der in Störungstheorie 1. Ordnung gewonnene Wert, wenn man die Wechselwirkung der Elektronen als Störung betrachtet.

Weitere Informationen unter:
http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~ewerz/qmueb01.html
http://www.thphys.uni-heidelberg.de/~dosch/qm01.html