

Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2021

Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann
Obertutor: Dr. Carsten Littek

Übungsblatt 12

Besprechung in den virtuellen Übungsgruppen in der Woche 05. - 09. Juli 2021

Bitte geben Sie maximal 2 Aufgaben per Übungsgruppensystem zur Korrektur an Ihre Tutorin / Ihren Tutor!

Nutzen Sie dazu den Link <https://uebungen.physik.uni-heidelberg.de/h/1291>

1. Verständnisfragen

- Warum müssen gleichartige quantenmechanische Teilchen prinzipiell ununterscheidbar sein?
- Erläutern Sie den Zusammenhang zwischen Spin und Statistik bei Fermionen und Bosonen.
- Warum wird die WKB-Näherung auch als semi-klassische Näherung bezeichnet? Welcher Aspekt davon ist klassisch?

2. Ritz'sches Variationsverfahren für das Helium-Atom

Der Hamilton-Operator des Helium-Atoms ist

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^{(1)} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta^{(2)} - \frac{2e^2}{r^{(1)}} - \frac{2e^2}{r^{(2)}} + \frac{e^2}{|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|},$$

wobei m die Elektronmasse und $-e$ die Ladung des Elektrons sind. Die Indizes in Klammern beziehen sich auf die beiden Elektronen, $r^{(1)} = |\vec{x}^{(1)}|$, $r^{(2)} = |\vec{x}^{(2)}|$. 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 des Hamilton-Operators, kann dieses Problem nicht exakt gelöst werden. Wir wollen deshalb das Ritz'sche Variationsverfahren anwenden, um die Grundzustandsenergie abzuschätzen.

Als einfache Testfunktion wollen wir das Produkt zweier Einteilchen-Wellenfunktionen ansetzen, die jeweils Eigenzustände des Coulomb-Problems 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

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

worin

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

die normierte Grundzustandswellenfunktion für das Coulomb-Problem mit der Kernladung Z ist und a_B den Bohr'schen Radius bezeichnet. (Beachten Sie, dass damit $\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$ normiert ist.) Finden Sie eine optimale Abschätzung für die Grundzustandsenergie des Heliumatoms, indem Sie Z_{eff} variieren.

Hinweis:

$$\int d^3x^{(1)} d^3x^{(2)} |\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})|^2 \frac{e^2}{|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|} = \frac{5}{8} \frac{Z_{\text{eff}} e^2}{a_B}$$

Bemerkung: Der mit dem Ritz'schen Variationsverfahren gewonnene Wert für die Grundzustandsenergie liegt um 2.7eV 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.

3. Endliche Kernaushdehnung und atomare Energieniveaus

Der Atomkern eines wasserstoffartigen Atoms werde als homogen geladene Kugel der Gesamtladung Ze mit Radius R aufgefasst. Das Elektron bewegt sich dann im Potential

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{2R} \left[3 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] & \text{für } r \leq R \\ -\frac{Ze^2}{r} & \text{für } r > R. \end{cases}$$

Behandeln Sie die *Abweichung* des Potentials $V(r)$ vom Coulomb-Potential eines punktförmigen Kerns als Störung.

- a) Berechnen Sie in 1. Ordnung Störungstheorie die Energieverschiebung des 1s-Zustands in Abhängigkeit vom Bohr'schen Radius a_B und Kernradius R . Nehmen Sie dabei an, dass $R \ll a_B$ ist.

Hinweis: Die Ortswellenfunktion $\psi_{100}^Z(\vec{x})$ des 1s-Zustands im Coulomb-Potential finden Sie in Aufgabe 2, wobei der Bohr'sche Radius $a_B \approx 5 \cdot 10^{-11}$ m ist. Verwenden Sie außerdem, dass $e^{-r/a_B} \approx 1$ für $r \leq R \ll a_B$ ist.

- b) Wie groß ist die Energieverschiebung beim Wasserstoff mit $Z = 1$ und $R = 1,2 \cdot 10^{-15}$ m?

4. Übergänge beim harmonischen Oszillator

Ein geladener eindimensionaler harmonischer Oszillator (Ladung q , Masse m , Kreisfrequenz ω) befinde sich zur Zeit $t_0 = -\infty$ in seinem Grundzustand. Im Zeitintervall $(-\infty, +\infty)$ werde er der Wirkung eines zeitabhängigen homogenen elektrischen Feldes E ausgesetzt.

- a) Wie lautet der entsprechende Hamilton-Operator?
- b) Fassen Sie nun die Wirkung des elektrischen Feldes als Störung auf. Berechnen Sie für die folgenden beiden Fälle in 1. Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie die Wahrscheinlichkeit dafür, den Oszillator zur Zeit $t = +\infty$ in seinem n -ten Energieeigenzustand ($n \neq 0$) anzutreffen.

(i) $E(t) = \frac{A}{\tau} e^{-t^2/\tau^2},$

(ii) $E(t) = \frac{A}{\tau} e^{-i\Omega t - |t|/\tau}.$

Diskutieren Sie Ihre Ergebnisse.

Hinweis: Benutzen Sie wieder, dass $\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-a(x+b)^2} = \sqrt{\pi/a}$ mit $\{a, b\} \in \mathbb{C}$ und $\text{Re}(a) \geq 0$.

Theoretische Physik IV: Quantenmechanik (PTP4)

Universität Heidelberg
Sommersemester 2021

Dozent: Prof. Dr. Matthias Bartelmann
Obertutor: Dr. Carsten Littek

Übungsblatt 12: Lösung

1. Verständnisfragen

- a) In einem System aus N gleichartigen quantenmechanischen Teilchen müssen diese Teilchen ununterscheidbar sein, da die Quantenmechanik nur Aussagen über Messungen zulässt nicht aber über das physikalische System selbst. So ist es prinzipiell unmöglich, eine Aussage darüber zu treffen, welches der N Teilchen zu einer bestimmten Messung beigetragen hat. Beachten Sie, dass im Formalismus den Teilchen Variablen ξ_i zugeordnet werden. Dies ist ein Hilfsmittel in der Beschreibung des quantenmechanischen Systems und bedeutet nicht, dass die Teilchen unterscheidbar sind. Da die Teilchen ununterscheidbar sind, bleibt der Zustand unter Permutation der Teilchen unverändert.
- b) Fermionen sind Teilchen mit halbzahligem Spin, wie z.B. Elektronen, Protonen oder Neutronen. Der Zustand identischer Fermionen ist antisymmetrisch unter Vertauschung zweier Teilchen. Bosonen hingegen sind Teilchen mit ganzzahligem Spin, wie z.B. Photonen oder ^4He -Nukleonen. Der Zustand identischer Bosonen ist symmetrisch unter Vertauschung zweier Teilchen.
- c) In der WKB-Näherung geht man davon aus, dass die de-Broglie-Wellenlänge λ_{dB} deutlich kleiner ist als die Längenskala, auf der sich das Potential ändert. Die Lösung für ein konstantes Potential ist eine ebene Welle, deren Phase aufgrund der Voraussetzung sehr groß ist. Wie Sie auf Übungsblatt 4 Aufgabe 2 bereits gesehen haben, wählt man den Ansatz

$$\psi(x) = \psi_0 \exp(iS(t, x)/\hbar)$$

mit der Phasenfunktion $S(t, x)$.^{*} Setzt man $\psi(x)$ in die Schrödinger-Gleichung ein, erhält man eine Differentialgleichung für $S(t, x)$, die im Fall $\hbar \rightarrow 0$ in die Hamilton-Jacobi-Gleichung der klassischen Mechanik übergeht.

Der klassische Aspekt dieser Näherung ist also, dass die Phase der Wellenfunktion sehr groß ist und insbesondere die Phasenfunktion $S(t, x)$ groß gegenüber \hbar ist. Dies führt dazu, dass die Phasenfunktion der klassischen Wirkung entspricht.

2. Ritz'sches Variationsverfahren für das Helium-Atom

Mit dem Ritz'schen Variationsverfahren kann man die Energie E_0 des Grundzustands abschätzen

$$\frac{\langle \psi | \hat{H} \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0.$$

Hier ist mit $|\psi\rangle$ ein Zustand bezeichnet, der kein Eigenzustand zu \hat{H} ist/sein muss. Wir haben unseren Ansatz für die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$ so gewählt, dass sie normiert ist, also

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1.$$

^{*}Die Phasenfunktion wird im Skript in Gleichung (12.48) als $\Phi_0(x)$ eingeführt.

Wir berechnen nun zuerst den Erwartungswert des Hamilton-Operators für ein einzelnes Teilchen

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{100}^Z | \hat{H}^{(1)} \psi_{100}^Z \rangle &= \frac{Z^3}{\pi a_B^3} \int d^3x e^{-\frac{Zr}{a_B}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{2e^2}{r} \right) e^{-\frac{Zr}{a_B}} \\
&= \frac{4Z^3}{a_B^3} \int dr r^2 e^{-\frac{Zr}{a_B}} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} r^{-2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{2e^2}{r} \right] e^{-\frac{Zr}{a_B}} \\
&= \frac{4Z^3}{a_B^3} \int dr e^{-\frac{Zr}{a_B}} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(2r \frac{\partial}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) - 2e^2 r \right] e^{-\frac{Zr}{a_B}} \\
&= \frac{4Z^3}{a_B^3} \int dr \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{2Zr}{a_B} + \frac{Z^2 r^2}{a_B^2} \right) - 2e^2 r \right] e^{-\frac{2Zr}{a_B}} \\
&= \frac{4Z^3}{a_B^3} \int dr \left[\left(\frac{Z\hbar^2}{ma_B} - 2e^2 \right) r - \frac{Z^2 \hbar^2}{2ma_B^2} r^2 \right] e^{-\frac{2Zr}{a_B}} \\
&= \frac{4Z^3}{a_B^3} \int dr \left[(Z-2) e^2 r - \frac{Z^2 e^2}{2a_B} r^2 \right] e^{-\frac{2Zr}{a_B}} \\
&= \frac{4Z^3}{a_B^3} \left[(Z-2) e^2 \frac{a_B^2}{4Z^2} - \frac{Z^2 e^2}{2a_B} \frac{a_B^3}{4Z^3} \right] \\
&= \left(\frac{Z^2}{2} - 2Z \right) \frac{e^2}{a_B}.
\end{aligned}$$

In dieser Rechnung haben wir ausgenutzt, dass der Bohr'sche Radius gegeben ist durch $a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}$. Als nächstes berechnen wir den Erwartungswert für den vollständigen Hamilton-Operator

$$\begin{aligned}
\langle \psi | \hat{H} \psi \rangle &= \int d^3x^{(1)} d^3x^{(2)} \psi_{100}^{Z_{\text{eff}*}}(\vec{x}^{(1)}) \psi_{100}^{Z_{\text{eff}*}}(\vec{x}^{(2)}) \hat{H} \psi_{100}^{Z_{\text{eff}}}(\vec{x}^{(1)}) \psi_{100}^{Z_{\text{eff}}}(\vec{x}^{(2)}) \\
&= \left(Z_{\text{eff}}^2 - 4Z_{\text{eff}} + \frac{5}{8} Z_{\text{eff}} \right) \frac{e^2}{a_B},
\end{aligned}$$

wobei wir das Integral aus dem Hinweis eingesetzt haben. Da wir nach einer optimalen Abschätzung der Energie des Grundzustands suchen, wollen wir diesen Ausdruck minimieren:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dZ_{\text{eff}}} \left(Z_{\text{eff}}^2 - 4Z_{\text{eff}} + \frac{5}{8} Z_{\text{eff}} \right) \frac{e^2}{a_B} &= 0 \\
\Rightarrow Z_{\text{eff}} &= \frac{27}{16} = 1.6875
\end{aligned}$$

Dies ist tatsächlich ein Minimum, da die zweite Ableitung positiv ist. Dies führt zu der Abschätzung

$$E_0 \leq \langle \psi | \hat{H} \psi \rangle = -77.5 \text{ eV}.$$

3. Endliche Kernaushdehnung und atomare Energieniveaus

a) Die Ortsdarstellung des Hamilton-Operators für das angegebene Potential ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
H &= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{r}}_{= H^{(0)}} + \underbrace{\left\{ \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{2R} \left[3 - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \right\}}_{= H^{(1)}} \theta_H(R-r),
\end{aligned}$$

wobei θ_H die Heaviside'sche Stufenfunktion ist, $H^{(0)}$ den ungestörten Hamilton-Operator beschreibt und $H^{(1)}$ die Störung.

Für die Energieverschiebung in 1. Ordnung Störungstheorie gilt dann, dass

$$\begin{aligned}
 E_{1s}^{(1)} &= \langle \psi_{100} | \hat{H}^{(1)} | \psi_{100} \rangle \\
 &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^\infty dr r^2 \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_B} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_B} \left\{ \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{2R} \left[3 - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \right\} \theta_H(R-r) \\
 &\quad \times \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_B} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_B} \\
 &= 4\pi \frac{Z^4 e^2}{\pi a_B^3} \int_0^R dr r^2 \left\{ \frac{1}{r} - \frac{1}{2R} \left[3 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \right\} \underbrace{e^{2Zr/a_B}}_{\approx 1} \approx \frac{4Z^4 e^2}{a_B^3} \int_0^R dr \left(r - \frac{3}{2R} r^2 + \frac{1}{2R^3} r^4 \right) \\
 &= \frac{4Z^4 e^2}{a_B^3} \left(\frac{1}{2} R^2 - \frac{1}{2} R^2 + \frac{1}{10} R^2 \right) = \frac{2}{5} \frac{Z^4 e^2 R^2}{a_B^3}.
 \end{aligned}$$

b) Für das Wasserstoffatom gilt mit den angegebenen Größen $E_{1s}^{(1)} = 5,6 \cdot 10^{-9} \text{ eV}$.

4. Übergänge beim harmonischen Oszillator

a) Der Hamilton-Operator lautet

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 - q E(t) \hat{x}.$$

b) Mit Hilfe von Auf- und Absteigeoperatoren und Besetzungszahloperator kann dieser geschrieben werden als

$$\hat{H} = \underbrace{\hbar \omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right)}_{= \hat{H}^{(0)}} - \underbrace{q E(t) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)}_{= \hat{H}^{(1)}}.$$

Hierbei ist wieder $\hat{H}^{(0)}$ der ungestörte Hamilton-Operator und $\hat{H}^{(1)}$ der (diesmal zeitabhängige) Störoperator. Die Störungstheorie kann angewendet werden, wenn die Störung $\hat{H}^{(1)}$ viel kleiner ist als $\hat{H}^{(0)}$. Dies stellt im Folgenden die Anforderung an die Amplitude A/τ des E -Feldes, genügend klein zu sein.

In 1. Ordnung zeitabhängiger Störungstheorie gilt für die Übergangswahrscheinlichkeit

$$p_{0n} = |c_{0n}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle n | \hat{H}^{(1)}(t) | 0 \rangle e^{i\omega_{n0}t} \right|^2 \quad \text{mit} \quad \omega_{n0} \equiv \frac{E_n^{(0)} - E_0^{(0)}}{\hbar} = n\omega.$$

(i) Mit $E(t) = (A/\tau) e^{-t^2/\tau^2}$ gilt

$$\begin{aligned}
 p_{0n} &= \frac{q^2 A^2}{\hbar^2 \tau^2} \frac{\hbar}{2m\omega} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t - t^2/\tau^2} \left(\underbrace{\langle n | \hat{a} | 0 \rangle}_{= 0} + \underbrace{\langle n | \hat{a}^\dagger | 0 \rangle}_{= \delta_{n1}} \right) \right|^2 = \frac{q^2 A^2}{2m\hbar\omega\tau^2} \delta_{n1} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t - t^2/\tau^2} \right|^2 \\
 &= \frac{q^2 A^2}{2m\hbar\omega\tau^2} \delta_{n1} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp \left[-\frac{1}{\tau^2} \left(t - i \frac{\omega \tau^2}{2} \right)^2 - \frac{\omega^2 \tau^2}{4} \right] \right|^2 = \frac{q^2 A^2}{2m\hbar\omega\tau^2} \delta_{n1} \left| e^{-\omega^2 \tau^2/4} \sqrt{\pi} \tau \right|^2 \\
 &= \frac{\pi q^2 A^2}{2m\hbar\omega} e^{-\omega^2 \tau^2/2} \delta_{n1}.
 \end{aligned}$$

Nur der Übergang in das erste angeregte Energieniveau ist möglich, und zwar mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_{01} = \frac{\pi q^2 A^2}{2m\hbar\omega} e^{-\omega^2 \tau^2 / 2}.$$

Übergänge in höhere Energieniveaus sind nicht möglich, da $p_{0n} = 0$ für $n > 1$.

- (ii) Die Rechnung geht ähnlich wie bei (i), nur die e-Funktion im Integral sieht jetzt anders aus,

$$\begin{aligned} p_{0n} &= \frac{q^2 A^2}{2m\hbar\omega\tau^2} \delta_{n1} \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega-\Omega)t - |t|/\tau} \right|^2 \\ &= \frac{q^2 A^2}{2m\hbar\omega\tau^2} \delta_{n1} \left| \int_{-\infty}^0 dt e^{[i(\omega-\Omega) + 1/\tau]t} + \int_0^{\infty} dt e^{[i(\omega-\Omega) - 1/\tau]t} \right|^2 \\ &= \frac{q^2 A^2}{2m\hbar\omega\tau^2} \delta_{n1} \left| \frac{1}{i(\omega-\Omega) + 1/\tau} - \frac{1}{i(\omega-\Omega) - 1/\tau} \right|^2 \\ &= \frac{2q^2 A^2}{m\hbar\omega\tau^2} \delta_{n1} \left[\frac{1/\tau}{(\omega-\Omega)^2 + 1/\tau^2} \right]^2. \end{aligned}$$

Wieder ist nur der Übergang in das erste angeregte Energieniveau möglich, und zwar mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_{01} = \frac{2q^2 A^2}{m\hbar\omega\tau^2} \left[\frac{1/\tau}{(\omega-\Omega)^2 + 1/\tau^2} \right]^2.$$

Dies hat die Form des Quadrates einer Lorentz-Kurve mit dem Maximum bei $\Omega = \omega$ und der Halbwertsbreite $\Delta\Omega = 1/\tau$. Übergänge in höhere Energieniveaus sind wieder nicht möglich, da $p_{0n} = 0$ für $n > 1$.