

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 $\text{Re}(a) \geq 0$.