14.1) $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$ Elektronen: $s = \pm\frac{1}{2}$

Nach dem Pauli-Verbot können in einem Energiezustand maximal zwei Teilchen (mit entgegengesetzten Spin) sein.

$E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ ✓

	BGA14
A54	~~4,5/5~~ 5/5
A55	5/15
Σ	9,5/20

V Jetummt

$\Sigma' = \frac{227,5}{280}$

$= 81\%$

ohne Gewähr

David
Lars
Jonah

a) → gerade N: $E_{ges} = 2\sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$

$= 2\hbar\omega\left(\sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} n - \frac{N}{4}\right)$

$= \hbar\omega\left(\frac{N^2}{4} + \frac{N}{2} - \frac{N}{2}\right)$

$= \frac{\hbar\omega}{4} N^2$ ✓

kein Blut!

ungerade N: $E_{ges} = \hbar\omega\left(\frac{N}{2} + 2\sum_{n=0}^{\frac{N-3}{2}}(n+\frac{1}{2})\right)$

$= \hbar\omega\left(\frac{2N}{4} - \frac{2N-2}{4} + 2\sum_{n=1}^{\frac{N-1}{2}} n\right)$

$= \hbar\omega\left(\frac{(N-1)^2}{4} + \frac{N}{2}\right)$

$= \hbar\omega\left(\frac{N^2+1}{4}\right)$ ✗ ~~$E = \frac{\hbar\omega}{4}(N+1)^2$~~ ~~$-0,5$~~

sorry, Fehler in Lösung!

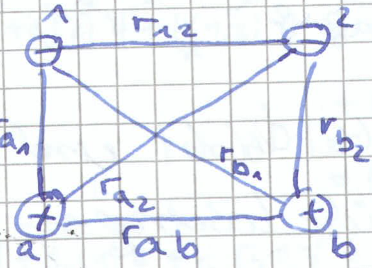
b) gerade N: $E_F = \hbar\omega\cdot\left(\frac{N-1}{2}\right)$ ✓

ungerade: $E_F = \frac{\hbar\omega N}{2}$ ✓

c) Für $N \gg 1$ ist die Gesamtenergie und die Fermi-Energie für gerade und ungerade N in etwa dieselbe: $E_{ges} = \frac{\hbar\omega}{4}N^2$ ✓, $E_F = \frac{\hbar\omega}{2}N$ ✓

2)

I:



Kern a $=: \vec{0}$

r_{ab} ist konstant → spielt keine Rolle!

$$\hat H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\Delta_{r_{a_1}} + \Delta_{r_{a_2}}\right) + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hat r_{12}} + \cancel{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hat r_{ab}}}$$

$$- \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\left(\frac{1}{\hat r_{a_1}} + \frac{1}{\hat r_{a_2}} + \overbrace{\frac{1}{|\hat r_{a_1}-\hat r_{ab}|}}^{=1/|r_{b_1}|} + \frac{1}{|\hat r_{a_2}-\hat r_{ab}|}\right) \quad f.$$

II:

$$\hat H = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_{r_{a_1}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{\hat r_{a_1}} + \frac{1}{|\hat r_{a_1}-\hat r_{ab}|}\right)}_{\hat H_{a_1}}$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_{r_{a_2}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{\hat r_{a_2}} + \overbrace{\frac{1}{|\hat r_{a_2}-\hat r_{ab}|}}^{=\frac{1}{|r_{b_2}|}}\right)}_{\hat H_{b_2}} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{\hat r_{12}} + \cancel{\frac{1}{\hat r_{ab}}}\right)}_{\hat W_{a_1 b_2}} \quad f.$$

III: $r_{ab}\to\infty$, $r_{12}\to\infty$, $r_{b_1}\to\infty$ $r_{a_2}\to\infty$

$$\Rightarrow \hat H = \underbrace{-\frac{\hbar}{2m_e}\Delta_{r_{a_1}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hat r_{a_1}}}_{\hat H_1} \underbrace{-\frac{\hbar}{2m_e}\Delta_{r_{a_2}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hat r_{b_2}}}_{\hat H_2}$$

Die Wechselwirkungsterme gehen gegen 0 und die Kerne WW. nur mit ihrem jeweiligen Elektron über das Coulomb-Potential.

⇒ Zwei einzelne Wasserstoffatome

$\hat H = \hat H_1 + \hat H_2$ $\qquad H\phi = E\phi$ (1)

Ansatz $\phi(r_{a_1}, r_{b_2}) = \Psi(r_{a_1})\cdot\chi(r_{b_2})$ in (1)

$\chi \hat H_1\Psi + \Psi\hat H_2\chi = E\Psi\chi$

$\Leftrightarrow \frac{\hat H_1\Psi}{\Psi} + \frac{\hat H_2\chi}{\chi} = E =$ konst

$\Rightarrow \hat H_1\Psi = E_{r_{a_1}}\Psi$ $\quad \cancel{E_{r_{a_1},n_a} = \hbar\omega(n_a+\frac{1}{2})}$ $\quad \cancel{E_{r_{a_1,0}} = E_{b_2,0} = \frac{\hbar\omega}{2}}$

$\hat H_2\chi = E_{r_{b_2}}\chi$ $\quad \cancel{E_{r_{b_2},n_b} = \hbar\omega(n_b+\frac{1}{2})}$ $\quad \cancel{E_0 = \hbar\omega}$

Siehe Hinweis. $\left\{ \Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0^3}\right)^{1/2} e^{-r_{a_1}/a_0} \;\middle|\; \chi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0^3}\right)^{1/2} e^{-r_{b_2}/a_0}\right.$

$\Rightarrow \phi(r_{a_1}, r_{b_2}) = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{1}{a_0}(r_{a_1}+r_{b_2})}$

iv)

sowohl $\phi_a(r_a)\phi_b(r_b)$ und $\phi_a(r_b)\phi_b(r_a)$ sind mögliche Lösungen des Systems

$\Rightarrow$ ~~Superposi~~ Linearkombination der Lösungen

$\Rightarrow \Psi = a \cdot \phi_a(r_a)\phi_b(r_b) + b \cdot \phi_a(r_b)\phi_b(r_a)$ (v)

v) $H\psi = H_1(1)\psi + H_2(2)\psi + H_{1,2}(1,2)\psi = aE_1 u + H_1(1)\varphi + aE_2 u + H_2(2)\varphi$

$+ H_{1,2}(1,2)(au + bv + \varphi) = a(E_1 + E_2)u + \dots$

$= (2E_H + \varepsilon)(au + bv) + 2E_H\varphi$

vi) $H\psi = H_1(2)\psi + H_2(1)\psi + H_{2,1}(2,1)\psi = bE_1 v + H_1(2)\varphi + bE_2 v + H_2(1)\varphi$

$+ H_{1,2}(1,2)(au + bv + \varphi) = b(E_1 + E_2)v + \dots$

$= (2E_H + \varepsilon)(au + bv) + 2E_H\varphi$

$H_1(1)\varphi + H_2(2)\varphi + H_{12}(1,2)\varphi = H_1(2)\varphi + H_2(1)\varphi + H_{12}(1,2)\varphi = 2E_H\varphi$

$\Rightarrow H\varphi = 2E_H\varphi$

Orthogonalitätsbedingungen fehlen.

5/15