

QUANTENMECHANIK II

Übungsserie 10

Wintersemester 16/17
Abgabe am 19.01.2017

Andrey Surzhykov
Robert Müller

Aufgabe 1 (Störungstheorie für Zweielektronensysteme) (3 Punkte)

Berechnen Sie die Grundzustandsenergie von He, Li⁺ und Be⁺⁺ in erster Ordnung Störungstheorie, werten Sie hierzu insbesondere das Matrixelement

$$\langle \psi_0 | \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} | \psi_0 \rangle = \frac{5}{8} Z \quad (1)$$

unter Zuhilfenahme der Multipolentwicklung des Wechselwirkungsoperators aus.

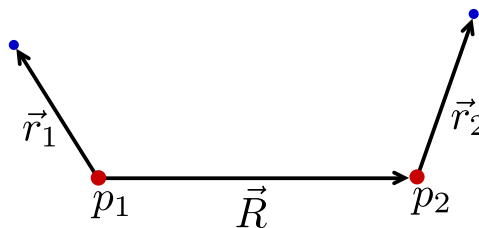
Aufgabe 2 (Variationsverfahren für Zweielektronensysteme) (3 Punkte)

Berechnen Sie die Grundzustandsenergie von He, Li⁺ und Be⁺⁺ mithilfe des Ritzschen Variationsverfahrens. Nutzen Sie als Testfunktion den einfachen Produktzustand

$$\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{Z_{eff}^3}{\pi} e^{-Z_{eff}(r_1+r_2)} \quad (2)$$

mit dem freien Parameter Z_{eff} . Vergleichen Sie ihre Ergebnisse mit den Resultaten aus Aufgabe 1 und experimentellen Werten (zu finden zum Beispiel in der *NIST atomic spectra database*). Zeigen Sie, dass die Differenz zwischen den Ergebnissen der Störungstheorie und der Variationsrechnung konstant und unabhängig von Z ist.

Aufgabe 3 (Van der Waals Wechselwirkung) (3 Punkte)



Nehmen Sie zwei Wasserstoffatome an, deren Abstand durch den Vektor \mathbf{R} beschrieben wird. Die jeweiligen Elektronen befinden sich an den Orten \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 gemessen vom jeweiligen Proton p_1 und p_2 . Zeigen Sie, dass für große Beträge R , die Wechselwirkung zwischen diesen beiden Atomen geschrieben werden kann als:

$$V = \left(\frac{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2}{R^3} - 3 \frac{(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{R})(\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{R})}{R^5} \right) + \mathcal{O}(R^{-4}) \quad (3)$$

Behandeln Sie dieses Potential als kleine Störung in erster Ordnung Störungstheorie. Berechnen Sie die Energiekorrektur erster Ordnung für den Fall, dass sich beide Wasserstoffatome im Grundzustand befinden.

Aufgabe 4 (*Bosonische Wellenfunktionen*) (1 Punkt)

In der Vorlesung haben Sie den allgemeinen Ausdruck für eine bosonische Wellenfunktion kennen gelernt:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = (N_1! \dots N_N! N!)^{-\frac{1}{2}} \sum_{P_{r_i}} \varphi_{p_1}(\mathbf{r}_1) \dots \varphi_{p_N}(\mathbf{r}_N) \quad (4)$$

wobei die Summe über alle möglichen Permutationen der \mathbf{r}_i läuft. Verifizieren Sie diesen Zusammenhang für $N = 3$.