Quantenmechanik II

Übungsserie 10

Wintersemester 17/18 **Andrey Surzhykov**
Abgabe am 18.01.2017 **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

$$\langle\psi_0|\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}|\psi_0\rangle = \frac{5}{8}Z \tag{1}$$

aus. Zur Erinnerung: Die Multipolentwicklung des Wechselwirkungsoperators lautet:

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|} = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\frac{4\pi}{2l+1}\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}Y_{lm}^*(\theta_1,\phi_1)Y_{lm}(\theta_2,\phi_2), \tag{2}$$

wobei $r_< = \min(r_1, r_2)$ und $r_> = \max(r_1, r_2)$.

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

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

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 *(Bosonische Wellenfunktionen)* (1 Punkt)

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

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

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