Prof. Dr. A. Schadschneider
C. Eilhardt, S. Nowak
Wintersemester 2011/12

Theoretische Physik in 2 Semestern II

8. Übung

www.thp.uni-koeln.de/~as/thp2sem1112.html

Abgabe: *Dienstag, 6. Dezember*

28. Helium-Atom und Variationsprinzip

8+5 Punkte

Heliumatome bestehen aus zwei Elektronen die sich im Potential eines Kerns mit Ladung $2e$ befinden. In dieser Aufgabe wollen wir die Grundzustandsenergie des He-Atoms mit Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\hat{\underline{r}}_1 - \hat{\underline{r}}_2|}, \quad Z = 2 \tag{1}$$

durch das Variationsprinzip abschätzen. Wir verwenden hierfür die Testwellenfunktion

$$\psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \psi_1(\underline{r}_1)\psi_2(\underline{r}_2), \quad \psi_i(x) = \sqrt{\frac{\tilde{Z}^3}{\pi a_0^3}} e^{-\tilde{Z} r_i / a_0}. \tag{2}$$

Mit $\tilde{Z} = Z$ wären die ψ_i Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms mit Kernladung $2e$, d.h. ohne den letzten Term in (1) wäre ψ Eigenfunktion von $\hat{H}$. Die Idee ist hier, dass die Elektronen durch die gegenseitige Abschirmung nur eine effektive Ladungszahl $\tilde{Z} < Z$ spüren.

a) Zeigen Sie, dass der Energieerwartungswert $\langle \hat{H} \rangle$ im Zustand ψ lautet:

$$\langle \hat{H} \rangle = 2 \text{ Ry} \cdot (\tilde{Z}^2 - 2Z\tilde{Z} + \frac{5}{8}\tilde{Z}),$$

wobei $\text{Ry} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \approx 13.6$ eV die Rydberg-Konstante ist. Sie dürfen die Ergebnisse für das Wasserstoffatom aus der Vorlesung sowie die Identitäten $\langle \psi_i | \frac{1}{r_i} | \psi_i \rangle = \frac{2\tilde{Z}}{e^2}$ Ry und $\langle \psi | \frac{1}{|\hat{\underline{r}}_1 - \hat{\underline{r}}_2|} | \psi \rangle = \frac{5\tilde{Z}}{4e^2}$ Ry verwenden.

b) Verwenden Sie das Variationsprinzip, um die Grundzustandsenergie E_0 abzuschätzen. Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem experimentellen Wert von $E_0^{(\text{exp})} \approx -5.807$ Ry.

29. Slater-Determinante

8+3 Punkte

In der Vorlesung wurde gezeigt, dass sich die Wellenfunktion zweier Fermionen als Differenz

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{n_1}(x_1)\chi_{n_2}(x_2) - \chi_{n_1}(x_2)\chi_{n_2}(x_1))$$

der Produkte der (orthonormierten) Ein-Teilchen-Wellenfunktionen $\chi_i(x)$ ergibt. Die gewünschten Eigenschaften der Wellenfunktion können durch Verwendung der sogenannten Slater-Determinante

$$\Psi(\vec{x}) = \Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \chi_{n_1}(x_1) & \cdots & \chi_{n_N}(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \chi_{n_1}(x_N) & \cdots & \chi_{n_N}(x_N) \end{pmatrix}.$$

auf N Teilchen verallgemeinert werden.

a) Zeigen Sie, das folgende Eigenschaften bei $N > 2$ erhalten bleiben:
(i) Antisymmetrie: $\Psi(x_1, \ldots, x_i, \ldots, x_j, \ldots, x_N) = -\Psi(x_1, \ldots, x_j, \ldots, x_i, \ldots, x_N)$
(ii) Pauli-Prinzip: $\Psi(x_1, \ldots, x, \ldots, x, \ldots, x_N) = 0$
(iii) Normierung: $\int dx_1 \ldots \int dx_N \; |\Psi(\vec{x})|^2 = 1$
Verwenden Sie dabei die allgemeine Definition und Rechenregeln für Determinanten von $N \times N$-Matrizen.

b) Die Wellenfunktion eines 4-Teilchen-Systems lautet:

$$\Psi(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{4!}} \det \begin{pmatrix} \chi_2(x_1) & \chi_4(x_1) & \chi_5(x_1) & \chi_7(x_1) \\ \chi_2(x_2) & \chi_4(x_2) & \chi_5(x_2) & \chi_7(x_2) \\ \chi_2(x_3) & \chi_4(x_3) & \chi_5(x_3) & \chi_7(x_3) \\ \chi_2(x_4) & \chi_4(x_4) & \chi_5(x_4) & \chi_7(x_4) \end{pmatrix}.$$

Wie lautet die entsprechende Besetzungszahlen-Darstellung?

30. Zwei Teilchen im Potential *3+8+8+7 Punkte*

Ein Teilchen befindet sich in einem beliebigen eindimensionalen Potential $V(x)$. Die Schrödingergleichung sei schon gelöst und es existiert ein orthonormaler Satz von reellen Wellenfunktionen $\psi_n(x)$ für den n-ten angeregten Zustand ($n \in \mathbb{N}$). Es erscheint nun ein zweites Teilchen im Potential, wobei es keine Wechselwirkung zwischen den Teilchen gibt. Weiterhin sei angenommen, dass beide Teilchen sich in unterschiedlichen Zuständen $n_1 \neq n_2$ befinden und es keinen Spin gibt.

a) Wie lautet die Gesamtwellenfunktionen $\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2)$ im Fall von (i) klassischen (unterscheidbaren) Teilchen, (ii) bosonischen (nicht-unterscheidbaren) Teilchen und (iii) fermionischen (nicht-unterscheidbaren) Teilchen. Im Folgenden werden die drei Fälle mit einem hochgestellten k für "klassisch", b für "bosonisch" und f für "fermionisch" gekennzeichnet.

b) Wir betrachten nun die Erwartungswerte des Quadrates des Abstandes der Teilchen für die drei Fälle, also

$$\Delta^k_{n_1 n_2} := \langle \psi^k_{n_1 n_2} | (\hat{x}_1 - \hat{x}_2)^2 | \psi^k_{n_1 n_2} \rangle$$

und analoger Definition für $\Delta^b_{n_1 n_2}$ und $\Delta^f_{n_1 n_2}$. Zeigen Sie, dass $\Delta^b_{n_1 n_2} = \Delta^k_{n_1 n_2} + \gamma$ und $\Delta^f_{n_1 n_2} = \Delta^k_{n_1 n_2} - \gamma$, wobei $\gamma = \langle \psi^k_{n_1 n_2} | (x_1 - x_2)^2 | \psi^k_{n_2 n_1} \rangle$ ist.

c) Zeigen Sie, dass $\gamma \leq 0$ ist und interpretieren Sie das Ergebnis.

d) Betrachten Sie ein Kastenpotential der Form

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

und eine zusätzliche "schwache" Wechselwirkung der Form

$$W(x_1, x_2) = \epsilon \delta(x_1, x_2)$$

zwischen den Teilchen. Berechnen Sie für zwei Bosonen bzw. zwei Fermionen in erster Ordnung Störungstheorie die Verschiebung ΔE der Energieniveaus im Grundzustand. Wie interpretieren Sie das Ergebnis?
Hinweis: Sie dürfen und sollten die bereits bekannten Ergebnisse für Teilchen im Kasten verwenden. Außerdem sollte folgendes Integral hilfreich sein: $\int_0^\pi \sin^4(x)\, dx = \frac{3\pi}{8}$.