Quanten Seminar 2

Christian Peltz

13.11.2005

1 Mehrteilchensystem

Berechnen Sie die Aufspaltung des Grundzustandes für die verschiedenen Isotope des Wasserstoffatoms (Wasserstoff, Deuterium, Tritium). Vergleichen Sie die Größe dieses Effektes mit dem in Aufgabe 1.3 abgeschätzten Isotopeneffektes infolge der endlichen Ausdehnung des Atomkerns.

Die korrekturlose Grundzustandsenergie ist gegeben durch:

$$E_1 = -\frac{m_e e^4}{8h^2\varepsilon_o^2} = -13,60569783eV$$

Unter Verwendung der reduzierten Masse ergeben sich folgenden Formeln:

$$E_{1,\mu} = -\frac{\mu e^4}{8h^2\varepsilon_o^2}$$

$$\mu = \frac{m_K * m_e}{m_K + m_e}$$

$$\mu_{Wasserstoff} = \frac{m_P * m_e}{m_P + m_e}$$

$$\mu_{Deuterium} = \frac{(m_P + m_N) * m_e}{(m_P + m_N) + m_e}$$

$$\mu_{Tritium} = \frac{(m_P + 2m_N) * m_e}{(m_P + 2m_N) + m_e}$$

Der Isotopeneffekt wurde in Aufgabe 1.3 folgendermaßen abgeschätzt:

$$\Delta E = 5,59neV * A^{\frac{2}{3}}$$

	$E_{reduzierte\ Masse}/eV$	$\Delta E_{reduzierte\ Masse}$
Wasserstoff	-13,5983	0,0074
Deuterium	-13,6020	0,0037
Tritium	-13,6032	0,0025

Der Effekt der reduzierten Masse nimmt wie zu erwarten war mit zunehmender Kernmasse ab. Die Näherung des ruhenden Kerns wird immer sinnvoller.

2 Ritzsches Variationsprinzip: Der harmonische Oszillator

Schätzen Sie die Grundzustandsenergie eines Teilchens im Potential

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

ab. Benutzen Sie die Testwellenfunktion

$$\psi = A\exp(\frac{-\lambda^2 x^2}{2})$$

mi dem zu variierenden Parameter λ.
Es lässt sich der folgende Hamiltonoperator konstruieren:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Nach dem Ritzschen Variationsprinzip nimmt der folgende Ausdruck sein Minimum für die Grundzustandsenergie an, allerdings nur bei der "richtigen" zu variierenden Funktion.

$$\frac{<\psi \mid H \mid \psi>}{<\psi \mid \psi>} \rightarrow Min$$

$$\frac{<\psi \mid H \mid \psi>}{<\psi \mid \psi>} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx^3 \psi \star H\psi}{\int_{-\infty}^{\infty} dx^3 \psi \star \psi}$$

Explizit:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx^3 \psi \star H\psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx^3 A\exp(\frac{-\lambda^2 x^2}{2})(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2)A\exp(\frac{-\lambda^2 x^2}{2})$$

$$= \frac{A^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} dx^3(\hbar^2\lambda^2 + (m^2\omega^2 - \hbar^2\lambda^4)x^2)\exp(-\lambda^2 x^2)$$

$$= \pm(\frac{A^2\hbar^2\lambda\sqrt{\pi}}{2m} + \frac{\frac{A^2}{2\lambda^3}(m^2\omega^2 - \hbar^2\lambda^4)\sqrt{\pi}}{2m}$$

$$= \frac{A^2\sqrt{\pi}}{2m}(\hbar^2\lambda + \frac{1}{2\lambda^3}(m^2\omega^2 - \hbar^2\lambda^4))$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx^3 \psi \star \psi = \frac{A^2\sqrt{\pi}}{\lambda}$$

$$\frac{<\psi \mid H \mid \psi>}{<\psi \mid \psi>} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx^3 \psi \star H\psi}{\int_{-\infty}^{\infty} dx^3 \psi \star \psi} = \frac{\frac{A^2\sqrt{\pi}}{2m}(\hbar^2\lambda + \frac{1}{2\lambda^3}(m^2\omega^2 - \hbar^2\lambda^4))}{\frac{A^2\sqrt{\pi}}{\lambda}}$$

$$= \frac{\lambda}{2m}(\hbar^2\lambda + \frac{m^2\omega^2}{2\lambda^3} - \frac{\hbar^2\lambda}{2})$$

$$= \frac{\hbar^2\lambda^2}{4m} + \frac{m\omega^2}{4\lambda^2}$$

$$= \frac{\hbar^2\lambda^4 + m^2\omega^2}{4m\lambda^2}$$

Das Minimum wird durch Ableiten nach λ bestimmt.

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}\frac{< \psi \mid H \mid \psi >}{< \psi \mid \psi >} = \frac{\hbar^2\lambda}{2m} - \frac{2m\omega^2}{4\lambda^3} = 0$$

$$\lambda^4 = \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}$$

Die obere Abschätzung der Grundzustandsenergie ergibt sich damit zu:

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{4m}\frac{m\omega}{\hbar} + \frac{m\omega^2}{4}\frac{\hbar^2}{m\omega}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}$$

Die Abschätzung der Grundzustandsenergie liefert den exakten Wert.

3 2-Elektronensystem

Berechnen Sie die Eigenwerte des Operators des Gesamtspins und des Operators der z-Komponente des Gesamtspins für ein 2-Elektronensystem. Gehen Sie von den mäglichen Kombinationen der linear unabhängigen Produkte der Einteilchen-Spinfunktionen, die zu einer symmetrischen oder antisymmetrischen Gesamtspinfunktion führen, aus.

Die Operatoren wirken folgendermaßen auf die Spinfunktionen:

$$\hat{S}_z \mid \chi_\pm >= \pm\frac{\hbar}{2} \mid \chi_\pm >$$

$$\hat{S}^2 \mid \chi_\pm >= \pm\frac{3}{4}\hbar^2 \mid \chi_\pm >$$

möglich Kombinationen für 2-Elektronensystem:

- symetrisch

$$\chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)} \Rightarrow \chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)}$$

$$\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} \Rightarrow \chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)})$$

- antisymetrisch

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)})$$

Eigenwerte für Operator des Gesamtspins $\hat{S}^2$:

- symetrisch

$$\hat{S}^2\chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)} = (\hat{S}^2\chi_+^{(1)})\chi_+^{(2)}+\chi_+^{(1)}(\hat{S}^2\chi_+^{(2)}) = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)}+\chi_+^{(1)}\frac{3}{4}\hbar^2\chi_+^{(1)} = \frac{3}{2}\hbar^2\chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)}$$

$$\hat{S}^2\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} = (\hat{S}^2\chi_-^{(1)})\chi_-^{(2)}+\chi_-^{(1)}(\hat{S}^2\chi_-^{(2)}) = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)}+\chi_-^{(1)}\frac{3}{4}\hbar^2\chi_-^{(1)} = \frac{3}{2}\hbar^2\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)}$$

$$\begin{aligned}\frac{\hat{S}^2}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)}+\chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) &= \frac{1}{\sqrt{2}}((\hat{S}^2\chi_+^{(1)})\chi_-^{(2)}+\chi_+^{(1)}(\hat{S}^2\chi_-^{(2)})+(\hat{S}^2\chi_-^{(1)})\chi_+^{(2)}+\chi_-^{(1)}(\hat{S}^2\chi_+^{(2)}))\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}((\frac{3}{4}\hbar^2\chi_+^{(1)})\chi_-^{(2)} + \chi_+^{(1)}(\frac{3}{4}\hbar^2\chi_-^{(2)}) + (\frac{3}{4}\hbar^2\chi_-^{(1)})\chi_+^{(2)} + \chi_-^{(1)}(\frac{3}{4}\hbar^2\chi_+^{(2)}))\\ &= \frac{3}{2}\hbar^2\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} + \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)})\end{aligned}$$

- antisymetrisch

$$\begin{aligned}\frac{\hat{S}^2}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)}-\chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) &= \frac{1}{\sqrt{2}}((\hat{S}^2\chi_+^{(1)})\chi_-^{(2)}+\chi_+^{(1)}(\hat{S}^2\chi_-^{(2)})-(\hat{S}^2\chi_-^{(1)})\chi_+^{(2)}-\chi_-^{(1)}(\hat{S}^2\chi_+^{(2)}))\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}((\frac{3}{4}\hbar^2\chi_+^{(1)})\chi_-^{(2)} + \chi_+^{(1)}(\frac{3}{4}\hbar^2\chi_-^{(2)}) - (\frac{3}{4}\hbar^2\chi_-^{(1)})\chi_+^{(2)} - \chi_-^{(1)}(\frac{3}{4}\hbar^2\chi_+^{(2)}))\\ &= \frac{3}{2}\hbar^2\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)} - \chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)})\end{aligned}$$

Eigenwerte für Operator der z-Komponente $\hat{S}_z$:

- symetrisch

$$\hat{S}_z\chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)} = (\hat{S}_z\chi_+^{(1)})\chi_+^{(2)}+\chi_+^{(1)}(\hat{S}_z\chi_+^{(2)}) = \frac{\hbar}{2}\chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)}+\chi_+^{(1)}\frac{\hbar}{2}\chi_+^{(1)} = \hbar\chi_+^{(1)}\chi_+^{(2)}$$

$$\hat{S}_z\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)} = (\hat{S}_z\chi_-^{(1)})\chi_-^{(2)}+\chi_-^{(1)}(\hat{S}_z\chi_-^{(2)}) = -\frac{\hbar}{2}\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)}-\chi_-^{(1)}\frac{\hbar}{2}\chi_-^{(1)} = -\hbar\chi_-^{(1)}\chi_-^{(2)}$$

$$\begin{aligned}\frac{\hat{S}_z}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)}+\chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) &= \frac{1}{\sqrt{2}}((\hat{S}_z\chi_+^{(1)})\chi_-^{(2)}+\chi_+^{(1)}(\hat{S}_z\chi_-^{(2)})+(\hat{S}_z\chi_-^{(1)})\chi_+^{(2)}+\chi_-^{(1)}(\hat{S}_z\chi_+^{(2)}))\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}((\frac{\hbar}{2}\chi_+^{(1)})\chi_-^{(2)} - \chi_+^{(1)}(\frac{\hbar}{2}\chi_-^{(2)}) - (\frac{\hbar}{2}\chi_-^{(1)})\chi_+^{(2)} + \chi_-^{(1)}(\frac{\hbar}{2}\chi_+^{(2)}))\\ &= 0\end{aligned}$$

- antisymetrisch

$$\frac{\hat{S}_z}{\sqrt{2}}(\chi_+^{(1)}\chi_-^{(2)}-\chi_-^{(1)}\chi_+^{(2)}) = \frac{1}{\sqrt{2}}((\hat{S}_z\chi_+^{(1)})\chi_-^{(2)}+\chi_+^{(1)}(\hat{S}_z\chi_-^{(2)})-(\hat{S}_z\chi_-^{(1)})\chi_+^{(2)}-\chi_-^{(1)}(\hat{S}_z\chi_+^{(2)}))$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}((\frac{\hbar}{2}\chi_+^{(1)})\chi_-^{(2)} - \chi_+^{(1)}(\frac{\hbar}{2}\chi_-^{(2)}) + (\frac{\hbar}{2}\chi_-^{(1)})\chi_+^{(2)} - \chi_-^{(1)}(\frac{\hbar}{2}\chi_+^{(2)}))$$

$$= 0$$