
Übungen zur Quantenmechanik II
Aufgabenblatt 4

Aufgabe 10 + 11

[10 Punkte]

Es soll die Form der Van der Waals Bindungsenergie zwischen 2 Wasserstoffatomen in Abhängigkeit vom Atomabstand störungstheoretisch berechnet werden.

Die beiden Atomkerne werden als an den Orten \underline{x}_A und \underline{x}_B ruhend angenommen, $\underline{R} = \underline{x}_A - \underline{x}_B$, $R = |\underline{R}|$.

Die Ortskoordinaten des zum "A"-Atom gehörenden Elektrons werden mit $\underline{x}^{(1)}$ bezeichnet und die des Elektrons zum "B"-Atom mit $\underline{x}^{(2)}$. Vom Elektronenspin soll abgesehen werden.

(a) Der Hamiltonoperator für das gemeinsame System aus "A"-Elektron und "B"-Elektron ist (mit $m =$ Elektronenmasse, $e =$ Elektronenladung) $H = H_0 + H_1$ mit

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\underline{x}^{(1)}} - \frac{e^2}{|\underline{x}_A - \underline{x}^{(1)}|} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\underline{x}^{(2)}} - \frac{e^2}{|\underline{x}_B - \underline{x}^{(2)}|} \quad \text{und}$$
$$H_1 = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{|\underline{x}^{(1)} - \underline{x}^{(2)}|} - \frac{e^2}{|\underline{x}_B - \underline{x}^{(1)}|} - \frac{e^2}{|\underline{x}_A - \underline{x}^{(2)}|}$$

Erläutern Sie die auftretenden Terme.

(b) Setzen Sie $\underline{y}^{(1)} = \underline{x}^{(1)} - \underline{x}_A$, $\underline{y}^{(2)} = \underline{x}^{(2)} - \underline{x}_B$, $\hat{R} = \underline{R}/R$, $\lambda = a^3/R^3$ mit $a =$ Bohrradius. Zeigen Sie: Für solche R , die groß sind gegenüber der Ausdehnung eines Atoms, gilt

$$H_1 = \lambda H_I + \text{Terme höherer Ordnung in } \lambda$$

mit

$$H_I = \frac{e^2}{a^3} \left(\underline{y}^{(1)} \cdot \underline{y}^{(2)} - 3(\underline{y}^{(1)} \cdot \hat{R})(\underline{y}^{(2)} \cdot \hat{R}) \right).$$

(c) Als "ungestörten Grundzustandsvektor" des Systems (ohne Wechselwirkungsterme) kann man

$$\Psi_0(\underline{x}^{(1)}, \underline{x}^{(2)}) = \psi_{A,n=1}(\underline{x}^{(1)} - \underline{x}_A)\psi_{B,n=1}(\underline{x}^{(2)} - \underline{x}_B)$$

betrachten, wobei $\psi_{\dots,n=1}$ der Grundzustandsvektor für das jeweilige Wasserstoffatom ist. Es gilt dann $H_0\Psi_0 = \epsilon_0\Psi_0$ mit $\epsilon_0 = 2E_1$ (2-fache Wasserstoff-Grundzustandsenergie).

/...2

Nehmen Sie als Störungs-Hamiltonoperator den Operator H_I und zeigen Sie: Die bzgl. des ϵ_0 -Niveaus von H_0 störungstheoretisch korrigierte Energie $\epsilon_2(\lambda)$ bis zur 2. Ordnung in λ ,

$$\epsilon_2(\lambda) = \epsilon_0 + \lambda\epsilon^{(1)} + \lambda^2\epsilon^{(2)}$$

ist bindend (d.h. $\epsilon_2(\lambda)$ wird kleiner, wenn R abnimmt – warum bezeichnet man das als "bindend"?)

Hinweis: Zeigen Sie zuerst, dass die Energiekorrektur 1. Ordnung verschwindet, und zeigen Sie dann, dass $\lambda^2\epsilon^{(2)} = C/R^6$ mit einem $C < 0$.

(d) Zeigen Sie, dass $-6e^2a^5 \geq C \geq -8e^2a^5$.

Aufgabe 12

[5 Punkte]

Sei $H_0 = \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, $H_I = \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$.

- Berechnen Sie die Eigenwerte von $H(\lambda) = H_0 + \lambda H_I$ in der Störungstheorie bis zur Ordnung λ^2 .
- Berechnen Sie die Eigenwerte von $H(\lambda)$ direkt.
- Vergleichen Sie die Potenzreihenentwicklungen in λ der Ergebnisse aus (a) und (b) bis zur 2. Ordnung in λ .
- Berechnen Sie die Resolventen $R_0(\zeta)$ bzw. $R_\lambda(\zeta)$.
- Zeigen Sie direkt, dass

$$R_\lambda(\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n R_0(\zeta) (H_I R_0(\zeta))^n$$

für bestimmte Werte (welche?) von λ und ζ gilt.

Abgabe: Am Montag, d. 08.05.2006, in der VL.

Hinweise zum Übungsbetrieb: Ab diesem Aufgabenblatt gilt: Abgabe der Bearbeitungen in festen Zweiergruppen. Es ist zwingend erforderlich, dass die beiden Partner jeder Zweiergruppe immer an derselben Übungsgruppe teilnehmen!

Mindestpunktzahl in den Hausaufgaben: 60% der erreichbaren Punkte.