Prof. Dr. R. Verch
Dr. P. Marecki

UNIVERSITÄT LEIPZIG

**Inst. f. Theoretische Physik**
Sommersemester 2006

---

# Übungen zur Quantenmechanik II
## Aufgabenblatt 8

---

**Aufgabe 22** Zwei Elektronen (mit Spin) befinden sich im 3-dimensionalen harmonischen Oszillatorpotential. Der Hamiltonoperator des 2-Teilchen Systems ist dann von der Gestalt

$$\begin{aligned} H &= H_0 + V \quad \text{mit} \qquad H_0 = H_{0(1)} + H_{0(2)}\,, \\ H_{0(f)} &= \frac{1}{2m_e}|\underline{P}_{(f)}|^2 + \frac{1}{2}m_e\omega^2|\underline{X}_{(f)}|^2 \quad (f=1,2)\,, \qquad V = \frac{e^2}{|\underline{X}_{(1)} - \underline{X}_{(2)}|} \end{aligned}$$

(i) Geben Sie die Eigenwerte und Eigenzustände von $H_0$ an.
(ii) Geben Sie in 1. Ordnung der Störungstheorie die Formel für die Energiekorrekturen der Eigenwerte von $H_0$ an für den Störungs-Hamiltonoperator $H_I = V$.
(iii) Berechnen Sie diese Energiekorrekturen für den niedrigsten und zweitniedrigsten Eigenwert von $H_0$ (werten Sie dazu die auftretenden Integrale numerisch aus) und vergleichen Sie die korrigierten Werte mit den unkorrigierten für $\omega/2\pi = 10^{10} sec^{-1}$.

*Hinweis:* Sie können die Eigenwerte und Eigenvektoren für den 3-dimensionalen harmonischen Oszillator der Literatur entnehmen.

**Aufgabe 23** Es seien $\mathcal{H}$ ein Hilbertraum, $\mathcal{F}_+(\mathcal{H})$ der Bose-Fockraum, und $\chi \in \mathcal{H}$ mit $||\chi|| = 1$. Auf Dirac geht die Idee für einen "Phasenoperator" $\Phi(\chi)$ in $\mathcal{F}_+(\mathcal{H})$ zurück, von dem angenommen wird, dass er selbstadjungiert (oder wenigstens hermitisch) ist und die Eigenschaften $a(\chi) = \underline{\underline{n}}(\chi)^{1/2}\mathrm{e}^{i\Phi(\chi)}$ und $a^+(\chi) = \mathrm{e}^{-i\Phi(\chi)}\underline{\underline{n}}(\chi)^{1/2}$ besitzt. ( $\underline{\underline{n}}(\chi) = a^+(\chi)a(\chi)$ )

(i) Zeigen Sie, dass es einen solchen Operator $\Phi(\chi)$ nicht geben kann, indem Sie zeigen, dass es keinen unitären Operator $V_\chi$ gibt mit der Eigenschaft

$$a(\chi) = \underline{\underline{n}}(\chi)^{1/2}V_\chi \quad \text{und} \quad a^+(\chi) = V_\chi^*\underline{\underline{n}}(\chi)^{1/2}\,.$$

(ii) Welche Kommutatorrelation mit $\underline{\underline{n}}(\chi)$ müsste $\Phi(\chi)$ erfüllen — wenn ein solcher Operator existierte? (Rechnen Sie mit den "Operatoren" formal.)

/...2

(iii) Zeigen Sie andererseits, dass auf $\mathcal{F}_+(\mathcal{H})$ ein linearer Operator $W_\chi$ definiert werden kann durch $a(\chi) = (\underline{\underline{n}}(\chi) + \mathbf{1})^{1/2} W_\chi$ bzw. $a^+(\chi) = W_\chi^*(\underline{\underline{n}}(\chi) + \mathbf{1})^{1/2}$, und dass für diesen Operator die Relationen

$$W_\chi W_\chi^* = \mathbf{1} \quad \text{und} \quad W_\chi^* W_\chi = \mathbf{1} - |0\rangle\langle 0|$$

gelten. (Einen Operator mit einer solchen Eigenschaft nennt man eine partielle Isometrie; $|0\rangle$ ist der Fock-Vakuum-Vektor.)

**Aufgabe 24** *(Beispiel für das Hartree-Fock-Verfahren)*
Betrachten Sie 2 fermionische quantenmechanische Teilchen der Masse $m$, die jeweils einen Spin-Freiheitsgrad tragen und sich in einem räumlich eindimensionalen harmonischen Oszillatorpotential bewegen und die über ein harmonisches Oszillatorpotential wechselwirken. D.h. der Hilbertraum jedes einzelnen Teilchens ist $L^2(\mathbb{R}, dx) \otimes \mathbb{C}^2$, und der Hamiltonoperator ist

$$H = H_{0(1)} + H_{0(2)} + H_I\,, \quad H_{0(j)} = \frac{1}{2m}|P_{(j)}|^2 + \frac{1}{2}m\omega^2|X_{(j)}|^2\,, \quad H_I = \alpha(X_{(1)} - X_{(2)})^2 \quad (\alpha \geq 0)\,.$$

(i) Berechnen Sie nach dem Hartree-Fock-Verfahren die Energie $E_n = (\overset{(n)}{\Psi}, H\overset{(n)}{\Psi})$ bis zur 3. Iteration (d.h. $n = 3$), wobei Sie als Anfangs-Slaterdeterminante

$$\overset{(1)}{\Psi} = (\psi_0 \otimes \psi_0) \otimes \chi^{\wedge}_{+-}$$

wählen, also ein Spin-Singlet mit der normierten Ortsraum-Wellenfunktion $\psi_0$, die dem Grundzustand des harmonischen Oszillators entspricht.

(ii) Die Grundzustandsenergie von $H$ lässt sich auch exakt bestimmen, indem $H$ durch Orts- und Impulsoperatoren bzgl. einer Relativkoordinaten und einer Schwerpunktskoordinaten ausgedrückt wird; $H$ nimmt dann die Form einer Summe von Hamiltonoperatoren zweier ungekoppelter Oszillatoren an. Ermitteln Sie auf diese Weise die exakte Grundzustandsenergie $E_0$ von $H$. Vergleichen Sie $E_0$ und $E_3$ als Funktionen von $\alpha$.

Wert jeder Aufgabe = 5 Punkte

Abgabe: Am Montag, d. 12.06.2006, in der VL.

**Klausurtermin: Mittwoch, 12.07.06, 16.00-19.00, Theorie-HS**

*Bitte helfen Sie den Korrektoren, indem Sie Ihre Abgaben* **zusammenheften!** *Ab jetzt wird es bei nicht zusammengehefteten Abgaben* **Punktabzug** *geben.*