

Prof. Dr. Harald Engel,
 Dipl. Phys. Stefan Fruhner, Dipl. Phys. Judith Lehnert, Dipl. Ing. Maximilian Schmitt
 Tanja Schlemm, Anke Zimmermann

10. Übungsblatt – Theoretische Physik II: Quantenmechanik

Abgabe: Di. 28.06.2011 8:15 Briefkasten ER-Geb./online über ISIS (max. 1MB)

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 22 (12 Punkte): Ionisiertes Wasserstoffmolekül H_2^+ : kovalente Bindung

Das ionisierte Wasserstoffmolekül H_2^+ besteht aus einem Elektron mit der Ortskoordinate \mathbf{r} und zwei Wasserstoffkernen mit den Massen M_1 und M_2 an den Orten \mathbf{R}_α und \mathbf{R}_β . Die aus der Born-Oppenheimer-Näherung resultierende Schrödinger-Gleichung für die elektronischen Zustände lautet:

$$H^{El} \psi_\nu(\mathbf{r}; \mathbf{R}_\alpha, \mathbf{R}_\beta) = E_\nu^{El}(\mathbf{R}_\alpha, \mathbf{R}_\beta) \psi_\nu(\mathbf{r}; \mathbf{R}_\alpha, \mathbf{R}_\beta)$$

mit dem Hamilton-Operator

$$H^{El} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{r_\alpha} - \frac{1}{r_\beta} \right).$$

Dabei hängen $E_\nu^{El}(\mathbf{R}_\alpha, \mathbf{R}_\beta)$ und $\psi_\nu(\mathbf{r}; \mathbf{R}_\alpha, \mathbf{R}_\beta)$ parametrisch von den Kernkoordinaten \mathbf{R}_α und \mathbf{R}_β ab. Für die Grundzustandswellenfunktion des H_2^+ -Ions kann näherungsweise der Ansatz

$$\psi(\mathbf{r}) = c_\alpha \varphi_\alpha(\mathbf{r}_\alpha) + c_\beta \varphi_\beta(\mathbf{r}_\beta)$$

verwendet werden, wobei c_α und c_β komplexe Koeffizienten und $\varphi_i(\mathbf{r}_i)$ um den i -ten Kern konzentrierte (normierte) Wellenfunktionen sind $i \in \{\alpha, \beta\}$.

- (a) Zeigen Sie, dass man mit obigem Ansatz nach dem Ritz'schen Variationsverfahren folgendes Gleichungssystem zur Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten c_α und c_β erhält:

$$(1) \quad \begin{pmatrix} H_{\alpha\alpha} - E^{El} T_{\alpha\alpha} & H_{\alpha\beta} - E^{El} T_{\alpha\beta} \\ H_{\beta\alpha} - E^{El} T_{\beta\alpha} & H_{\beta\beta} - E^{El} T_{\beta\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_\alpha \\ c_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

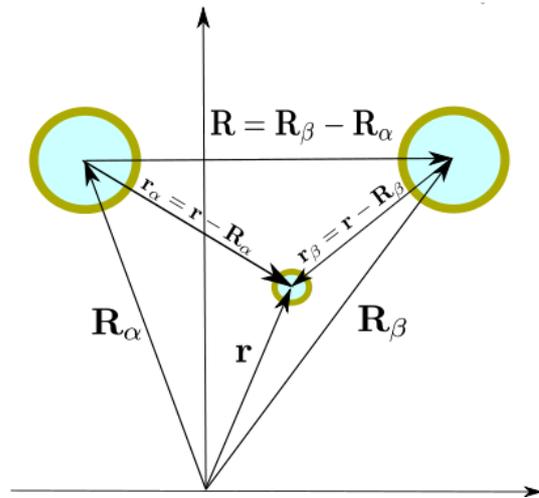
Die Matrixelemente H_{ij} des Hamilton-Operators und die Überlappmatrixelemente T_{ij} sind dabei definiert durch

$$H_{ij} = \int \varphi_i^* H^{El} \varphi_j d^3\mathbf{r}; \quad T_{ij} = \int \varphi_i^* \varphi_j d^3\mathbf{r}.$$

- (b) Zeigen Sie, dass aus Gl. (1) für die elektronischen Energieeigenwerte und -zustände folgt:

$$E_\pm = \frac{H_{\alpha\alpha} \pm H_{\alpha\beta}}{1 \pm T}; \quad \psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm T)}} (\varphi_\alpha \pm \varphi_\beta).$$

Hinweis: Es gilt $H_{\alpha\alpha} = H_{\beta\beta}$ und $H_{\alpha\beta} = H_{\beta\alpha}$. Denken Sie auch daran, dass die Wellenfunktion normiert sein muss.



Bitte Rückseite beachten! →

10. Übung TPII SS11

Bemerkung: Man kann sich dem Problem auch von einer anderen Seite nähern. Eine einfache Beschreibung für das Elektron im H_2^+ -Ion ist durch folgendes Modellpotenzial gegeben:

$$V(x) = -\frac{e^2}{\pi\epsilon_0}(\delta(x-a) + \delta(x+a)).$$

Die Lösung erfolgt dann ähnlich zu Aufgabe 5 (δ -Potenzial)

Aufgabe 23 (8 Punkte): Gestörter harmonischer Oszillator

Betrachten Sie den gestörten harmonischen Oszillator $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ mit

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad \text{und} \quad \hat{H}_1 = \epsilon c\hat{x}^4$$

mit $|\epsilon| \ll 1$.

- (a) Drücken Sie den Hamiltonoperator mit Hilfe von Leiteroperatoren \hat{a} und \hat{a}^\dagger aus.
- (b) Berechnen Sie die Energiekorrektur erster Ordnung $E_n^{(1)}$ und geben Sie explizit $E_0^{(1)}$ an.
- (c) Berechnen Sie nun auch die zweite Energiekorrektur zur Grundzustandsenergie.

Hinweis: Die Summation in der zweiten Energiekorrektur erfolgt über **alle** ungestörten Eigenfunktionen von \hat{H}_0 . Begründen Sie zunächst, warum die meisten Summanden keinen Beitrag zum Ergebnis leisten.

Aktuelle Informationen werden auf der Webseite bekannt gegeben. Diese ist zu erreichen über

<http://www.tu-berlin.de/?98665>

Wochenplan

	Di	Mi	Do
8-10	VL EW 203	VL EW 202	
10-12	Tut H 2033 TS		Tut EW 226 TS
12-14	Tut EB 133C M/S	Tut EW 226 AZ	
14-16	Tut ER 164 M/S		Tut EB 417 AZ

M/S – Max Schmitt/Stefan Fruhner, TS – Tanja Schlemm, AZ – Anke Zimmermann

Sprechzeiten:	Name	Tag	Zeit	Raum	Tel.
	Prof. Dr. H. Engel	Mi.	14:30-16:00	EW 738	79462
	Stefan Fruhner	Fr.	14:00-15:00	EW 627/28	27681
	Max Schmitt	Do.	10:00-11:00	EW 708	25225
	Tanja Schlemm	Fr.	11:00-12:00	EW 060	26143
	Anke Zimmermann	Di.	12:00-13:00	EW 060	26143