

Prof. Dr. Harald Engel  
 Dipl. Phys. Mathias Hayn  
 Wassilij Kopylov, M.Sc.  
 Jan Tötz, M.Sc.

## 6. Übungsblatt – Quantenmechanik II

**Abgabe: Di. 11. 12. 2012 bis 18:00 Uhr im Briefkasten am Ausgang des ER-Gebäudes**

*Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in 3er-Gruppen erfolgen. Bitte geben Sie Ihre Namen, Matrikelnummer und das Tutorium an!*

### **Aufgabe 13 (13 Punkte):** Zur zweiten Quantisierung

Der Hamilton-Operator in zweiter Quantisierung, ausgedrückt durch Feldoperatoren  $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ , kann in der Form  $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$  mit

$$\hat{H}_1 = \int_V d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{h}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad \hat{H}_2 = \int_V d^3r_1 \int_V d^3r_2 \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}_2) \hat{u}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_2) \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1) \quad (1)$$

geschrieben werden. Dabei ist  $\hat{H}_1$  ( $\hat{H}_2$ ) der sogenannte Ein-Teilchen-(Zwei-Teilchen-)Hamilton-Operator,  $\hat{h}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(r)$ ,  $V(r)$  ein Ein-Teilchen-Potential und  $\hat{u}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  steht für eine Zwei-Teilchen-Wechselwirkung.

- (a) Die Feldoperatoren lassen sich mithilfe eines vollständigen Orthonormalsystems  $\varphi_n(\mathbf{r})$  durch Auf- und Absteigeoperatoren durch  $\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_n \varphi_n(\mathbf{r}) \hat{a}_n$  darstellen. Zeigen Sie umgekehrt, dass

$$\hat{a}_n^\dagger = \int_V d^3r \varphi_n(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \quad (2)$$

gilt.

- (b) Drücken Sie den Hamilton-Operator (1) durch die Auf- und Absteigeoperatoren aus,  $\hat{H}_1 = \sum_{n_1, n_2} h_{n_1, n_2} \hat{a}_{n_1}^\dagger \hat{a}_{n_2}$  und  $\hat{H}_2 = \sum_{n_1, n_2, n_3, n_4} u_{n_1, n_2, n_3, n_4} \hat{a}_{n_1}^\dagger \hat{a}_{n_2}^\dagger \hat{a}_{n_3} \hat{a}_{n_4}$  und bestimmen Sie  $h_{n_1, n_2}$  und  $u_{n_1, n_2, n_3, n_4}$ .

Wir betrachten nun den Spezialfall  $V(\mathbf{r}) = 0$ . Dann bilden ebene Wellen  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  Eigenzustände des Ein-Teilchen-Hamilton-Operators  $\hat{h}(\mathbf{r})$ . Außerdem soll das Zwei-Teilchen-Wechselwirkungspotential nur vom Abstand abhängen,  $\hat{u}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \hat{u}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ .

- (c) Zeigen Sie, dass der Hamilton-Operator aus Teilaufgabe (b) sich dann zu

$$\hat{H}_1 = \sum_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}}, \quad \hat{H}_2 = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad (3)$$

vereinfacht und interpretieren Sie den Wechselwirkungs-Hamilton-Operator  $\hat{H}_2$ . Hierbei ist  $u_{\mathbf{q}}$  die Fourier-Transformierte des Wechselwirkungspotentials  $u(\mathbf{r})$ .

- (d) Sei nun  $|0\rangle$  der Vakuumzustand, d.h.  $\hat{a}_{\mathbf{k}} |0\rangle = 0, \forall \mathbf{k}$ . Zeigen Sie explizit, dass der Zustand  $\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle$  ein Teilchen mit dem Impuls  $\hbar \mathbf{k}$  beschreibt. Zeigen Sie entsprechend, dass  $\hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle$  ein Zwei-Teilchenzustand mit den Impulsen  $\mathbf{k}_1$  und  $\mathbf{k}_2$  darstellt. *Hinweis: Sie können dazu die in der Vorlesung eingeführte Vielteilchenwellenfunktion/Wahrscheinlichkeitsamplitude  $\Phi_{[n_1, n_2, \dots]}^{(n)}$  benutzen.*

6. Übung TPV WS12/13

- (e) Benutzen Sie allein die (Anti-)Vertauschungsrelationen der Erzeuger und Vernichter um die Norm, die Energie und den Gesamtimpuls der beiden Zustände aus Teilaufgabe (d) zu bestimmen. *Hinweis: der Operator des Gesamtimpulses ist durch  $\hat{\mathbf{P}} = \int_V d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} \hat{\Psi}(\mathbf{r})$ , mit dem Ein-Teilchen-Impulsoperator  $\hat{\mathbf{p}}$  gegeben.*

**Aufgabe 14 (7 Punkte): Variationsverfahren für Helium-Grundzustand**

Wir betrachten ein Helium-Atom, d.h. ein System aus zwei Elektronen mit den Ortskoordinaten  $\mathbf{r}_1$  und  $\mathbf{r}_2$  und einem Kern der Ladung  $Z = 2$  am Ort  $\mathbf{R} = 0$ . Der Hamilton-Operator der zwei Elektronen sei gegeben durch

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}(\Delta_1 + \Delta_2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( -\frac{Z}{|\mathbf{r}_1|} - \frac{Z}{|\mathbf{r}_2|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right).$$

Um die Grundzustands-Wellenfunktion des Helium-Atoms näherungsweise zu bestimmen, benutzen wir den folgenden Ansatz:  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, Z_{\text{eff}}) = \psi_{100}(\mathbf{r}_1, Z_{\text{eff}})\psi_{100}(\mathbf{r}_2, Z_{\text{eff}})$ , wobei

$$\psi_{100}(\mathbf{r}, Z_{\text{eff}}) := 2 \left( \frac{Z_{\text{eff}}}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Z_{\text{eff}}}{a_0}|\mathbf{r}|} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

die Grundzustands-Wellenfunktion eines Elektrons im Feld eines Kernes mit Ladung  $Z_{\text{eff}}$  ist.

- (a) Zeigen Sie, dass die Variation des Parameters  $Z_{\text{eff}}$  nach dem Ritz'schen Variationsverfahren (Minimierung des Energieerwartungswertes für einen Satz von Testfunktionen zur Approximierung der Grundzustandsenergie, siehe Tutorium) zu einem Extremum bei  $Z_{\text{eff}} = Z - 5/16$  führt und daraus der Näherungswert

$$E_g = \min \left( \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = \left[ -2Z^2 + \frac{5}{4}Z - 2 \left( \frac{5}{16} \right)^2 \right] \text{Ry}$$

für die Grundzustandsenergie des Helium-Atoms folgt ( $1 \text{ Ry} \approx 13.6 \text{ eV}$ ).

- (b) Berechnen Sie die Grundzustands-Energiekorrektur des Helium-Atoms durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in 1. Ordnung Störungstheorie. Vergleichen Sie diesen Wert mit dem Ergebnis aus der Variationsrechnung und dem experimentellen Wert  $E_g = -78.975 \text{ eV}$ .
- (c) Wie lässt sich anschaulich erklären, dass der Wert von  $Z_{\text{eff}}$  gegenüber der Kernladung  $Z = 2$  des Helium-Atoms reduziert ist?

*Hinweis: Im Tutorium wird gezeigt*

$$\int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, Z_{\text{eff}})|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3r_1 d^3r_2 = \frac{5}{8} \frac{Z_{\text{eff}}}{a_0}.$$