Übungsblatt 11 zur "Einführung in die Quantentheorie"

WS 2011/12   Prof. H. Köppel

Abgabetermin 23.01.2012 (11:00)

Aufgabe 1 (Zweikörperproblem und reduzierte Masse).

a) Rekapitulieren Sie die Rechenschritte des beigefügten Beiblatts zum Zweikörperproblem und bestätigen Sie damit den Ausdruck für die reduzierte Masse $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$ für die Relativbewegung des Zweikörperproblems. (2P)

b) Betrachten Sie die klassischen Newtonschen Bewegungsgleichungen für zwei Massenpunkte, die aufeinander mit der entgegengesetzt gleichen Kraft wirken:

$$m_1 \frac{d^2\vec{r}_1}{dt^2} = -\vec{F} \qquad m_2 \frac{d^2\vec{r}_2}{dt^2} = \vec{F}\,.$$

Leiten Sie durch Bilden geeigneter Linearkombinationen die untenstehenden Bewegungsgleichungen für die Schwerpunkts- und Relativkoordinate ab (für Notation vergleiche Beiblatt): (3P)

$$M \frac{d^2\vec{R}}{dt^2} = 0\,, \qquad \mu \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \vec{F}\,.$$

Interpretieren Sie das Ergebnis anschaulich. (1P)

Aufgabe 2 (Effektives Potential in wasserstoffähnlichen Systemen).

In wasserstoffähnlichen Systemen bewegt sich das Elektron im effektiven Potential

$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\,, \qquad l > 0\,.$$

a) Skizzieren Sie $V_{\text{eff}}(r)$ und bestimmen Sie dessen Minimum $V_{\text{eff}}(r_{\text{min}})$. (2P)

b) Wie groß ist die Energiedifferenz zwischen den exakten Energieeigenwerten wasserstoffähnlicher Systeme und $V_{\text{eff}}(r_{\text{min}})$, wobei der Fall $n = l+1, l > 0$ betrachtet werden soll (also für $2p$, $3d$, $4f, \ldots$ Zustände)? (2P)

Aufgabe 3 (Variationsansatz für das Wasserstoffatom).

Für den Grundzustand des H-Atoms soll die Funktion

$$\Psi_{1s}(r,\theta,\phi) = N(\alpha)e^{-\alpha r}$$

bezüglich α optimiert werden, was dem Minimum des zugehörigen Erwartungswertes

$$E(\alpha) = \frac{\langle\Psi_{1s}|\hat{H}|\Psi_{1s}\rangle}{\langle\Psi_{1s}|\Psi_{1s}\rangle}\,, \quad \text{mit} \quad \frac{dE(\alpha)}{d\alpha} = 0$$

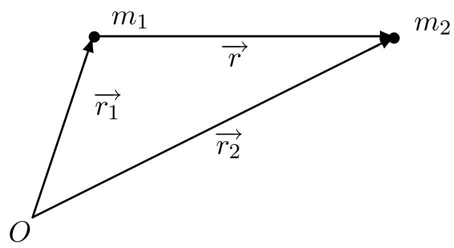
entspricht. Ermitteln Sie den so definierten optimalen Wert für α, bestimmen Sie den entsprechenden Energieerwartungswert und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem niedrigsten Energieeigenwert der Vorlesung. (4P)

Schwerpunkts- und Relativkoordinaten beim Zweikörperproblem

Betrachte 2 Massenpunkte (z.B. Atome eines zweiatomigen Moleküls), die miteinander wechselwirken.

Klassische kinetische Energie:

$$T = \frac{m_1}{2}\,\dot{\vec{r_1}}^2 + \frac{m_2}{2}\,\dot{\vec{r_2}}^2 \ .$$



Definiere Schwerpunkts- und Relativkoordinaten durch (vgl. Skizze):

$$\begin{cases} \vec{R} = & \frac{m_1\vec{r_1}+m_2\vec{r_2}}{m_1+m_2} \\ \vec{r} = & \vec{r_2}-\vec{r_1} \end{cases} .$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \tfrac{m_1+m_2}{m_2}\vec{R} - \vec{r} &= \vec{r_1}\left(1+\frac{m_1}{m_2}\right) \\ \tfrac{m_1+m_2}{m_1}\vec{R} + \vec{r} &= \vec{r_2}\left(1+\frac{m_2}{m_1}\right) \end{aligned}$$

Es folgt:

$$\begin{aligned} m_1\vec{r_1}^2 + m_2\vec{r_2}^2 &= m_1\left(\vec{R}-\frac{m_2}{M}\vec{r}\right)^2 + m_2\left(\vec{R}+\frac{m_1}{M}\vec{r}\right)^2 \\ &= (m_1+m_2)\vec{R}^2 + \frac{m_1m_2^2+m_2m_1^2}{M^2}\vec{r}^2 \end{aligned}$$

Analoge Beziehungen gelten für die Zeitableitungen aller Ortsvektoren.

$$\Rightarrow \boxed{T = \frac{M}{2}\,\dot{\vec{R}}^2 + \frac{\mu}{2}\,\dot{\vec{r}}^2} \ ,$$

wobei $M = m_1 + m_2$ und $\mu = \frac{m_1 m_2}{M}$ die Gesamt- bzw. reduzierte Masse ist.

$\Longrightarrow$ Separation von Schwerpunkts- und Relativbewegung!