Übungsblatt 12 zur "Einführung in die Quantentheorie"

WS 2012/13 Prof. H. Köppel

Abgabetermin 28.01.2013 (11:00)

Aufgabe 1 (Orts- und Spinfunktionen).

a) Verifizieren Sie die auf dem Beiblatt 'Allgemeine Zweielektronenfunktionen (2 Elektronen in 2 verschiedenen räumlichen Orbitalen)' vom 23.1. angegebene Darstellung von $\frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_0 + \Psi_0')$ als Produkt einer Orts- und Spinfunktion. (2P)

b) Überzeugen Sie sich, dass der normierte Ortsanteil von Ψ_1, Ψ_{-1} und $\frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_0 + \Psi_0')$ in allen drei Fällen identisch ist und bestimmen Sie den jeweiligen Eigenwert M_S der z-Komponente des Gesamtspins $\hat{s}_z = \hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z}$. (2P)

c) Wiederholen Sie die Rechnung von Aufgabenteil a für $\frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_0 - \Psi_0')$ und bestimmen Sie analog zu Aufgabenteil b den Eigenwert M_S der z-Komponente des Gesamtspins. (2P)

d) Welche der betrachteten Spinfunktionen ist für den Fall gleicher Ortsfunktionen $\psi_a = \psi_b$ sinnvoll? (1P)

e) Welches Argument spricht für die auf dem Beiblatt angegebene Zuordnung zu Singulett (S=0) und Triplett (S=1)? (1P)

Aufgabe 2 (Verallgemeinertes Eigenwertproblem).

Gegeben sei das verallgemeinerte 2×2 Eigenwertproblem

$$\underline{\underline{H}}\,\vec{c} = E\underline{\underline{S}}\,\vec{c} \quad \text{mit} \quad \underline{\underline{H}} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{S}} = \begin{pmatrix} 1 & S \\ S & 1 \end{pmatrix}.$$

Bestimmen Sie die Eigenwerte E durch Lösen der Säkulardeterminante (6P)

$$\det(\underline{\underline{H}} - E\underline{\underline{S}}) = 0$$

und für jeden der beiden Eigenwerte den normierten Eigenvektor $\vec{c}$ gemäß

$$\vec{c}^T \underline{\underline{S}}\vec{c} = 1\,.$$

Bitte wenden!

Aufgabe 3 (Entartungsgrad beim dreidimensionalen HO).
Die Energieeigenwerte des dreidimensionalen harmonischen Oszillators sind

$$E_N = \hbar\omega(N + \tfrac{3}{2}), \quad N = n_x + n_y + n_z \,.$$

Stellen Sie bis zu $N = 3$ die möglichen (n_x, n_y, n_z) Tripel tabellarisch dar und verfizieren Sie damit die Beziehung für den Entartungsgrad g_N: (2P)

$$g_N = \frac{(N+1)(N+2)}{2} \,.$$

Aufgabe 4 (Hamilton-Operator in dimensionslosen Koordinaten).

Zeigen Sie, dass der Hamilton-Operator für das Wasserstoff-Atom in dimensionslosen Koordinaten $\tilde{\nabla} = a_0 \nabla$ und $\tilde{r} = \frac{r}{a_0}$ geschrieben werden kann, wenn Energien in Hartree und Abstände in Vielfachen des Bohr'schen Radius a_0 angegeben werden.

$$E_{Hartree} = 2R_\infty = \frac{\hbar^2}{m_e a_0^2} \,, \qquad a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$$

Drücken Sie hierfür ausgehend vom bekannten Hamilton-Operator r und ∇ in reduzierten Einheiten aus. Überzeugen Sie sich, dass der Hamilton-Operator in dimensionslosen Koordinaten und Energien die folgende Form annimmt: (3P)

$$\tilde{H} = -\frac{1}{2}\tilde{\nabla}^2 - \frac{1}{\tilde{r}}$$
