Moderne Theoretische Physik II

V: Prof. Dr. D. Zeppenfeld, Ü: Dr. M. Rauch

Übungsblatt 10

Abgabe: Fr, 13.01.17
Besprechung: Di, 17.01.17

Aufgabe 29: Helium-Atom (*6+5+1=12 Punkte*)

Betrachten Sie ein Helium-Atom, gegeben durch

$$H = \underbrace{\frac{\vec{p}_1^{\,2}}{2m} + \frac{\vec{p}_2^{\,2}}{2m} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}}_{H_0} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}}_{V},$$

wobei $r_{1,2} = |\vec{x}_{1,2}|$ und $r_{12} = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$.
Betrachtet man nur H_0, so ist die Lösung das Produkt zweier Wasserstoffwellenfunktionen ψ mit $Z = 2$. Da die Elektronen Fermionen sind, müssen wir aber noch passend symmetrisieren, um eine total antisymmetrische Wellenfunktion zu erhalten, sodass sich

$$\varphi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\psi_{100}(\vec{x}_1)\psi_{nlm}(\vec{x}_2) \pm \psi_{100}(\vec{x}_2)\psi_{nlm}(\vec{x}_1)\Big) \text{ für } \begin{cases} s = 0 \\ s = 1 \end{cases}$$

ergibt, wenn ein Elektron im Grundzustand und das andere in einem angeregten Zustand ist.
Nun fügen wir V als Störung zu H_0 hinzu und beschränken uns auf den Fall $n = 2$, $l = 1$.

(a) Berechnen Sie das "Coulomb-Integral"

$$I = \int \mathrm{d}^3x_1 \mathrm{d}^3x_2 \, |\psi_{100}(\vec{x}_1)|^2 \, |\psi_{21m}(\vec{x}_2)|^2 \, \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \, .$$

(b) Berechnen Sie das "Austauschintegral"

$$J = \int \mathrm{d}^3x_1 \mathrm{d}^3x_2 \, \psi_{100}(\vec{x}_1)\psi_{21m}(\vec{x}_2) \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \, r_{12}} \psi^*_{100}(\vec{x}_2)\psi^*_{21m}(\vec{x}_1) \, .$$

(c) Benutzen Sie die beiden Integrale und drücken damit die Gesamtenergie des (1s)(2p)-Zustands für beide Spinkonfigurationen in erster Ordnung Störungstheorie durch die Feinstrukturkonstante α, den Bohrradius a_0 sowie $\hbar c$ aus.

Hinweis:
Verwenden Sie für die beiden Integrale die Identitäten

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} = \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\gamma}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} P_l(\cos\gamma)\,,$$

wobei $(r_< = \min(r_1, r_2),\ r_> = \max(r_1, r_2))$*, sowie*

$$P_l(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} Y_l^{m*}(\Omega_1) Y_l^m(\Omega_2)$$

und die Orthogonalitätsrelationen der Kugelflächenfunktionen. Setzen Sie, um letztere ausnutzen zu können, die explizite Form der Kugelflächenfunktionen in den Wellenfunktionen zunächst noch nicht ein.
Nützliche Integrale:

$$\int \mathrm{d}x\, x e^{-ax} = -\frac{e^{-ax}}{a^2}(ax+1)\,, \qquad \int_0^{\infty} \mathrm{d}x\, x^n e^{-ax} = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad \textit{für } a > 0,\ \textit{ganzzahliges } n > 0\,,$$

$$\int \mathrm{d}x\, x^2 e^{-ax} = -\frac{e^{-ax}}{a^3}(a^2x^2 + 2ax + 2)\,.$$

Aufgabe 30: Propagator des harmonischen Oszillators (*1+4+2+1=8 Punkte*)

Wir untersuchen den Propagator $\langle q_f, T | q_i, 0\rangle$ eines eindimensionalen Systems.

(a) Zeigen Sie aufgrund der Vollständigkeit der Energieeigenzustände $|n\rangle$ zur Energie E_n des Systems, dass

$$\langle q_f, T | q_i, 0\rangle = \sum_n \varphi_n(q_f)\varphi_n^*(q_i) e^{-i\frac{E_n T}{\hbar}}\,, \tag{1}$$

wobei $\varphi_n(q) = \langle q | n\rangle$.

(b) Der Propagator des harmonischen Oszillators kann aus der Pfadintegraldarstellung berechnet werden und lautet

$$\langle q_f, T | q_i, 0\rangle = \left[\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin\omega T}\right]^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega T}\left[(q_f^2 + q_i^2)\cos\omega T - 2q_i q_f\right]\right\}\,. \tag{2}$$

Bestimmen Sie hieraus die Grundzustandswellenfunktion $\varphi_0(q)$. Betrachten Sie dazu imaginäre Zeiten $T = -it$, $t \to +\infty$ und vergleichen Sie Gl. (1) und (2).

(c) Bestimmen Sie die Wellenfunktion $\varphi_1(q)$ des ersten angeregten Zustands.

(d) Zeigen Sie aus Gl. (1) und (2), dass die Energieniveaus $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ lauten.

Frohe Festtage und einen guten Rutsch ins Neue Jahr!