

---

Übungen zur Quantenmechanik (12-PHY-BTP2)  
Aufgabenblatt 13

---

Die Aufgaben auf diesem Aufgabenblatt sind *Zusatzaufgaben*, d.h. es können Punkte durch Bearbeitung der Aufgaben erworben werden, aber die Punkte dieses Aufgabenblatts zählen nicht zur Gesamtpunktzahl, von der 50% (= 144 Punkte) erworben sein müssen, um an der Modulprüfung teilnehmen zu können.

**Aufgabe 13.1**

[Wert = 12 Zusatzpunkte]

In dieser Aufgabe sollen Sie mit Hilfe des **Ritzschen Variationsverfahrens** die Grundzustandsenergie des Hamiltonoperators für das Wasserstoffatom,

$$H = \frac{1}{2m^*} |\vec{P}|^2 - \frac{e^2}{|\vec{X}|},$$

definiert auf einem Bereich genügend regulärer Funktionen im  $L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ , abschätzen. Beim Ritzschen Variationsverfahren wird nach Wahl einer (genügend regulären) Familie von Versuchsfunktionen  $\psi_s$ , parametrisiert durch  $s > 0$ , das Minimum der Funktion

$$s \mapsto (\psi_s, H\psi_s) / (\psi_s, \psi_s)$$

bestimmt. Führen Sie das Variationsverfahren für die folgenden Wahlen von Versuchsfamilien durch:

- (i)  $\psi_s(\vec{x}) = \varphi(s\vec{x})$  mit einem beliebigen (genügend regulären)  $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$ .
- (ii) Wie in (i), mit  $\varphi(\vec{x}) = e^{-|\vec{x}|}$ .
- (iii) Wie in (i), mit  $\varphi(\vec{x}) = (1 + |\vec{x}|^2)^{-1}$ .

Vergleichen Sie die Ergebnisse zu (ii) und (iii) mit der exakten Grundzustandsenergie für das Wasserstoffatom.

*Hinweis:* Drücken Sie bei (i) die Normierung und die Erwartungswerte von kinetischer und potentieller Energie bzgl.  $\psi_s$  durch die entsprechenden Größen bzgl.  $\varphi$  aus, also durch  $N(\varphi) = (\varphi, \varphi)$ ,  $T(\varphi) = (\varphi, |\vec{P}|^2\varphi) / 2m^*$  und  $V(\varphi) = (\varphi, (\frac{e^2}{|\vec{X}|})\varphi)$ , jeweils multipliziert mit einer Potenz von  $s$ . Für das Einsetzen der konkreten (radialsymmetrischen) Funktionen in (ii) und (iii) benutzen Sie den Laplace-Operator in Kugelkoordinaten.

/...2

Alle für die Berechnung der Erwartungswerte benötigten Integrale über  $r = |\vec{x}|$  können Sie Formelsammlungen entnehmen oder mit Hilfe von Computerprogrammen berechnen.

### Aufgabe 13.2

[Wert = 12 Zusatzpunkte]

Das Quantensystem aus einem Proton und einem Elektron, die über das Coulomb-Potential wechselwirken, kann beschrieben werden durch den System-Hilbertraum  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}_{\text{Proton}}^3 \times \mathbb{R}_{\text{Elektron}}^3)$ , und den Hamiltonoperator<sup>1</sup>

$$(H_{\text{ww}}\Psi)(\underline{x}_p, \underline{x}_e) = \left( \frac{-\hbar^2}{2m_p} \Delta_{\underline{x}_p} + \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta_{\underline{x}_e} - \frac{\alpha}{|\underline{X}_p - \underline{X}_e|} \right) \Psi(\underline{x}_p, \underline{x}_e)$$

für  $\Psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}_{\text{Proton}}^3 \times \mathbb{R}_{\text{Elektron}}^3)$ . ( $m_p$  = Protonmasse,  $m_e$  = Elektronmasse,  $\alpha$  = eine geeignete Konstante.)

Führen Sie die *Schwerpunktskoordinaten*  $\underline{x}_{\text{cm}} = \frac{1}{m_p+m_e}(m_p\underline{x}_p + m_e\underline{x}_e)$  ein und die *Relativkoordinaten*  $\underline{x}_r = \underline{x}_p - \underline{x}_e$ . Betrachten Sie die Abbildung  $T : \mathbb{R}_{\text{Proton}}^3 \times \mathbb{R}_{\text{Elektron}}^3 \rightarrow \mathbb{R}_{\text{cm}}^3 \times \mathbb{R}_r^3$ , die durch

$$T : \begin{pmatrix} \underline{x}_p \\ \underline{x}_e \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \underline{x}_{\text{cm}} \\ \underline{x}_r \end{pmatrix}$$

erklärt wird, und die Abbildung  $U : L^2(\mathbb{R}_{\text{Proton}}^3 \times \mathbb{R}_{\text{Elektron}}^3) \rightarrow L^2(\mathbb{R}_{\text{cm}}^3 \times \mathbb{R}_r^3)$ , die definiert ist durch

$$(U\Psi)(\underline{x}_{\text{cm}}, \underline{x}_r) = \Psi \circ T^{-1}(\underline{x}_{\text{cm}}, \underline{x}_r).$$

Zeigen Sie, dass  $U$  eine unitäre Abbildung definiert. Zeigen Sie außerdem, dass (auf allen  $\Psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}_{\text{Proton}}^3 \times \mathbb{R}_{\text{Elektron}}^3)$ ) gilt

$$H_{\text{ww}}\Psi = U^{-1}H_{\text{rel}}U\Psi,$$

wobei

$$(H_{\text{rel}}\Phi)(\underline{x}_{\text{cm}}, \underline{x}_r) = \left( \frac{-\hbar^2}{2(m_p + m_e)} \Delta_{\underline{x}_{\text{cm}}} + \frac{-\hbar^2}{2m^*} \Delta_{\underline{x}_r} - \frac{\alpha}{|\underline{X}_r|} \right) \Phi(\underline{x}_{\text{cm}}, \underline{x}_r)$$

mit  $m^* = m_p m_e / (m_p + m_e)$  (reduzierte Masse). Erläutern Sie, welchen Zusammenhang dies damit hat, dass üblicherweise das quantenmechanische Problem der Bewegung eines Elektrons in Wechselwirkung mit einem Proton angesehen wird als das quantenmechanische Problem der Bewegung eines Elektrons in einem externen Coulombpotential (in der klassischen Mechanik gibt es eine analoge Situation unter dem Begriff "Abseparation der Schwerpunktsbewegung").

/...3

<sup>1</sup>In den Aufgabe 13.2 und 13.3 werden Elemente des  $\mathbb{R}^3$  durch Unterstreichung anstatt wie üblich durch Vektorpfeile gekennzeichnet

### Aufgabe 13.3

[Wert = 12 Zusatzpunkte]

Wenn das Problem der gebundenen Zustände des Elektrons (ohne Spin) in einem Wasserstoffartigen Atom gemäß der Schrödingergleichung angesehen wird als nicht-relativistischer Limes der Diracgleichung, dann muss berücksichtigt werden, dass Elektronen nicht besser lokalisiert werden können als bis auf Abmessungen ihrer Compton-Wellenlänge  $\hbar/m_e c$ . Dieser Delokalisierungseffekt kann dadurch modelliert werden, dass das Coulomb-Potential  $V(\underline{x})$ , in dem das Elektron sich bewegt, ersetzt wird durch eine "verschmierte" Variante  $\mathcal{V}_f(\underline{x})$ , für die folgender phänomenologischer Ansatz gemacht wird:

$$\mathcal{V}_f(\underline{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} f(|\underline{u}|) V(\underline{x} + \underline{u}) d^3 u.$$

Dabei ist  $f : [0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$  eine  $C^\infty$  Funktion derart, dass  $f(r) = 0$  für  $r \geq \hbar/m_e c$ ,  $f(r) > 0$  für  $r < \hbar/m_e c$  und mit  $\int_{\mathbb{R}^3} f(|\underline{u}|) d^3 u = 1$ .

(a) Zeigen Sie, dass

$$\mathcal{V}_f(\underline{x}) = V(\underline{x}) + O\left[\left(\frac{\hbar}{m_e c}\right)^2\right] \cdot \Delta_{\underline{x}} V(\underline{x}) + O\left[\left(\frac{\hbar}{m_e c}\right)^4\right].$$

(Hinweis: Streng genommen gilt dies im Sinne von Distributionen, also nachdem beide Seiten mit einer Schwartzfunktion  $h(\underline{x})$  multipliziert und bzgl.  $\underline{x}$  integriert worden sind.)

(b) Aus Betrachtung der Diracgleichung erhält man  $O\left[\left(\frac{\hbar}{m_e c}\right)^2\right] = \hbar^2/(8m_e^2 c^2)$ , und die Energiekorrektur

$$H_D(\underline{x}) = \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \Delta_{\underline{x}} V(\underline{x})$$

wird *Darwin Term* genannt. Zeigen Sie, dass diese Energiekorrektur in den Erwartungswerten der Eigenvektorbasis  $\psi_{nlm}$  für das Wasserstoffatom nur dann beiträgt, wenn  $\ell = 0$  ist. D.h. zeigen Sie

$$(\psi_{nlm}, H_D \psi_{nlm}) = \begin{cases} -E_n \frac{\alpha^2}{n}, & \text{falls } \ell = 0 \\ 0 & \text{falls } \ell \neq 0 \end{cases}$$

Abgabe: Bis Do., 06.07.2017, vor der Vorlesung