Fakultät für Physik
C. Ewerz

Universität Bielefeld
Wintersemester 2007/08

3. Übung zur Quantenmechanik II

Abgabe der schriftlichen Aufgaben: 9.11.2007
Besprechung der Präsenzaufgaben: 12.11.2007

S 5 Helium-Atom (8 Punkte)

Der Hamiltonoperator des Helium–Atoms ist

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta^{(1)} - \frac{\hbar^2}{2m}\Delta^{(2)} - \frac{2e_0^2}{r^{(1)}} - \frac{2e_0^2}{r^{(2)}} + \frac{e_0^2}{|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|}\,, \tag{1}$$

wobei m die Elektronmasse und $-e_0$ die Ladung des Elektrons. Die Indizes in Klammern beziehen sich auf die beiden Elektronen, $r^{(1)} = \left|\vec{x}^{(1)}\right|$, $r^{(2)} = \left|\vec{x}^{(2)}\right|$. Der Hilbertraum dieses Problems wird im Ortsraum durch Zweiteilchen–Wellenfunktionen $\phi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$ aufgespannt. Aufgrund der Wechselwirkung der Elektronen (vgl. den letzten Term in Gl. (1)) kann dieses Problem nicht exakt gelöst werden. Wir wollen deshalb das Ritzsche Variationsverfahren anwenden, um die Grundzustandsenergie abzuschätzen.

Als einfache Testfunktion wollen wir das Produkt zweier Einteilchen–Wellenfunktionen ansetzen, die jeweils Eigenzustände des Coulombproblems beschreiben. Es erscheint physikalisch sinnvoll anzunehmen, daß das Feld des Kerns teilweise durch das jeweils andere Elektron abgeschirmt wird. Wir wollen dies in der Wahl der Testfunktion berücksichtigen, indem wir in den beiden Einteilchenfunktionen die Kernladung als freien Parameter wählen, den wir dann variieren. Wir setzen also an

$$\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}) = \psi_{100}^{Z_{\text{eff}}}(\vec{x}^{(1)})\psi_{100}^{Z_{\text{eff}}}(\vec{x}^{(2)}) \tag{2}$$

worin

$$\psi_{100}^{Z}(\vec{x}) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}}\,\exp\left(\frac{-Zr}{a_0}\right) \tag{3}$$

die normierte Grundzustandswellenfunktion für das Coulombproblem mit der Kernladung Z ist. (Beachten Sie, daß damit $\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})$ auf 1 normiert ist.) Finden Sie eine optimale Abschätzung für die Grundzustandsenergie des Heliumatoms, indem Sie Z_{eff} variieren.

Hinweis:

$$\int d^3x^{(1)} d^3x^{(2)} \left|\psi(\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)})\right|^2 \frac{e_0^2}{|\vec{x}^{(1)} - \vec{x}^{(2)}|} = \frac{5}{8}\frac{Z_{\text{eff}} e_0^2}{a_0} \tag{4}$$

Bemerkung: Der mit dem Ritzschen Variationsverfahren gewonnene Wert für die Grundzustandsenergie liegt um 2.7 eV näher am experimentell gemessenen Wert

($E_0 = -78.8\,\mathrm{eV}$) als der in Störungstheorie 1. Ordnung gewonnene Wert, wenn man die Wechselwirkung der Elektronen als Störung betrachtet.

P 6 Eichinvarianz (6 Punkte)

Der Hamiltonoperator für ein Teilchen der Masse m und der Ladung e im elektromagnetischen Feld ist

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\left(\vec{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\Phi\,, \tag{5}$$

worin $\vec{A}$ und Φ die Potentiale für die Felder $\vec{\mathbf{E}}$ und $\vec{\mathbf{B}}$ sind. Zeigen Sie, daß die zeitabhängige Schrödingergleichung ihre Form behält, wenn man eine Eichtransformation der Potentiale,

$$\vec{A} \;\;\rightarrow\;\; \vec{A}' = \vec{A} - \nabla\Lambda \tag{6}$$

$$\Phi \;\;\rightarrow\;\; \Phi' = \Phi + \frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t} \tag{7}$$

mit einer beliebigen Funktion $\Lambda(\vec{x}, t)$, und gleichzeitig eine lokale Phasentransformation der Wellenfunktion

$$\psi(\vec{x}, t) \;\;\rightarrow\;\; \psi'(\vec{x}, t) = \exp\left[-\frac{ie}{\hbar c}\,\Lambda(\vec{x}, t)\right]\psi(\vec{x}, t) \tag{8}$$

durchführt.

P 7 Umlaufzahl und Polarwinkelform (6 Punkte)

Wir wollen im zweidimensionalen Raum $\mathbb{R}^2$ das Vektorfeld

$$\vec{A}(x, y) = \left(-\frac{y}{x^2+y^2}, \frac{x}{x^2+y^2}\right) \tag{9}$$

betrachten.

(a) Zeigen Sie, daß

$$\frac{\partial A_1}{\partial y} = \frac{\partial A_2}{\partial x} \tag{10}$$

und $\vec{A} = \vec{\nabla} f(x, y)$ mit $f(x, y) = \arctan\left(\frac{y}{x}\right)$.

(b) Man kann zeigen, daß für jede geschlossene Kurve C

$$\int_C \vec{A}\cdot\vec{ds} = 2\pi n\,, \tag{11}$$

wobei $n \in \mathrm{Z}$ die Umlaufzahl des Weges C um den Ursprung bezeichnet. Überprüfen Sie dies an Beispielen (etwa für geeignete Kreiswege).

Bemerkung: Wegen dieses Resultats wird $\theta = \vec{A}\cdot\vec{ds}$ als Polarwinkelform bezeichnet. In der nächsten Übung werden wir sehen, daß diese in der Quantenmechanik eine wichtige Anwendung beim Aharonov–Bohm–Effekt findet.

Weitere Informationen unter:
http://www.thphys.uni-heidelberg.de/∼ewerz/qm2-0708.html