Universität Regensburg Wintersemester 07-08

Quantentheorie II

Prof. Klaus Richter Dr. Andrea Donarini

Blatt 9

1. Spin-Spin-Kopplung

a) • Geben Sie die vollständig symmetrisierten bzw. antisymmetrisierten Gesamtzustände von zwei Spin-1/2 Teilchen an, die sich in den Einteilchenzuständen $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$ befinden können. Durch welchen Gesamtspin zeichnen sich diese Zustände jeweils aus? Welche dieser Zustände können von Fermionen besetzt werden, wenn die Ortswellenfunktionen beider Teilchen identisch sind? (2 Punkte)

b) Betrachten Sie jetzt zwei Spin-1 Teilchen. Welche der Eigenzustände $|s, m_s\rangle$ des Quadrats bzw. der z-Komponente des Gesamtspinoperators $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ können von Bosonen besetzt werden, wenn die Ortswellenfunktionen beider Teilchen identisch sind?

2. Wasserstoff-Molekül-Ion H_2^+

Betrachte ein 1D Modell des Wasserstoff-Moleküls. Wir beschränken uns hier auf ein einzelnes Elektron im System, was ein Wasserstoff-Molekül-Ion H_2^+ ergibt.

a) • Schreibe den elektronischen Hamiltonian für das System in der Born-Oppenheimer Näherung. Zeige, dass – wenn alle Längen in Einheiten des Bohr-Radius a_0 und alle Energien in Einheiten der Rydberg-Energie E_1 des Wasserstoff-Atoms gegeben sind – die Schrödingergleichung geschrieben werden kann als:

$$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} - \frac{2}{|\xi + D/2|} - \frac{2}{|\xi - D/2|} + \frac{2}{D}\right)\psi_n(\xi) = E_n(D)\psi_n(\xi)$$

wobei $D = R/a_0$ der einheitenlose Abstand der Kerne und $V_0(\xi) = 2/|\xi|$ die Coulomb-Wechselwirkung ist.

Hinweis: Bohr-Radius und Rydberg-Energie sind definiert in fundamentalen Konstanten:

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.053 \text{ nm}$$

$$E_1 = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2} \approx -13.6\ e\text{V}$$

(1 Punkt)

b) • In der Näherung für ein kurzreichweitiges Potential zwischen Elektron und Kern gilt: $V_0(\xi) = 2/|\xi| \to 2\delta(x)$ (mit der Dirac-delta-Distribution $\delta(x)$). Berechne in dieser Näherung die Eigenfunktion und -energie des Grundzustands für ein einzelnes, isoliertes Wasserstoffatom.

Hinweis: Bedenke das die Eigenfunktionen der Schödingergleichung mit einem delta-Potential in der Ableitung eine Unstetigkeitsstelle haben. (2 Punkte)

c) • Berechne eine genäherte Lösung für das volle Problem des H_2^+-Moleküls per Variations-Methode. Wähle als Ansatz für die Testfunktion eine Linearkombination der atomaren Grundzustände aus Teilaufgabe b):

$$\psi_v = c_A \psi_A + c_B \psi_B$$

und ersetze in der Schrödingergleichung von Teilaufgabe a) die Coulomb-Potentiale durch delta-Potentiale für die Wellenfunktionen $\psi_{A,B}$. Projiziere die Gleichung auf die Basis $\psi_{A/B}$ und löse das Eigenwertproblem. (2 Punkte)

d) Untersuche das Verhalten der Eigenwerte aus Teilaufgabe c) als Funktion des Kernabstandes. Ist das Molekül stabil?

e) Löse die Schrödingergleichung für das Elektron im zweifachen delta-Potential und vergleiche die Grundzustandsenergie mit der Abschätzung aus Teilaufgabe d).

Frohes Schaffen!

Abgabe der Hausaufgaben (markiert durch •) bis Montag 17.12. um 10 Uhr.