

Übungen zur Quantenmechanik II

Blatt 2_{Hilton}

Aufgabe 3: Spinwellenfunktion von Para-Helium

3 Punkte

Begründen Sie, dass der bei der Behandlung des Helium-Atoms aufgetretene Parazustand mit Spinwellenfunktion

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{\uparrow} \otimes \chi_{\downarrow} - \chi_{\downarrow} \otimes \chi_{\uparrow})$$

einen verschwindenden Gesamtspin hat.

Tipp: Drücken Sie die y - und z -Komponenten der individuellen Spins in

$$\mathbf{s}^2 = (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2)^2 = \mathbf{s}_1^2 + \mathbf{s}_2^2 + 2\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2 = \frac{3\hbar^2}{2} + 2(s_{1x}s_{2x} + s_{1y}s_{2y} + s_{1z}s_{2z})$$

durch die Aufsteige- und Absteigeoperatoren $s_{1,\pm}$ und $s_{2,\pm}$ aus und benutzen Sie zum Beispiel, dass $s_+\chi_{\uparrow} = 0$ und $s_+\chi_{\downarrow} = \hbar\chi_{\uparrow}$ gelten.

Aufgabe 4: Slater Determinante

1 Punkt

Es sei $\psi_{\alpha}(\xi)$ ein Einteilchenzustand mit Quantenzahlen α . Dabei steht das Argument ξ für die Freiheitsgrade des Teilchens (oft Ort und Spin). Begründen Sie, dass der N -Teilchen Produktzustand, definiert durch die Slater-Determinante

$$\psi_{\alpha_1, \dots, \alpha_N}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \det \begin{pmatrix} \psi_{\alpha_1}(\xi_1) & \psi_{\alpha_1}(\xi_2) & \dots & \psi_{\alpha_1}(\xi_N) \\ \psi_{\alpha_2}(\xi_1) & \psi_{\alpha_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{\alpha_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \psi_{\alpha_N}(\xi_1) & \psi_{\alpha_N}(\xi_2) & \dots & \psi_{\alpha_N}(\xi_N) \end{pmatrix}$$

vollständig anti-symmetrisch ist, wenn zwei Teilchen vertauscht werden. Zeigen Sie auch, dass ψ_{α} verschwindet, wenn die Funktionen $\psi_{\alpha_1}, \dots, \psi_{\alpha_N}$ linear abhängig sind (zum Beispiel, wenn $\psi_{\alpha_1} = \psi_{\alpha_2}$ ist).

Bemerkung Die Lösung dieser Aufgabe sollte ohne Rechnung geschehen.

Aufgabe 5: Variationsrechnung für ersten angeregten Zustand

1+4 = 5 Punkte

In dieser Aufgabe erweitern wir das Variationsprinzip auf den ersten angeregten Zustand. Wir betrachten (der Einfachheit halber) einen Hamilton-Operator H mit diskretem Spektrum $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$:

- Ist der Grundzustand $|\psi_0\rangle$ nicht entartet, dann gilt

$$E_1 = \min_{|\psi\rangle: \langle\psi_0|\psi\rangle=0} \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

Beweisen Sie diese Formel. Der Beweis ist analog dem Beweis des Variationsprinzips für die Energie des Grundzustands. Wie sieht die Formel aus, wenn E_0 entartet ist?

- Wir betrachten den eindimensionalen anharmonischen Oszillator mit Hamilton-Operator

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \lambda x^4.$$

Da die Wellenfunktion des Grundzustands spiegelsymmetrisch ist, ist jede ungerade Wellenfunktion senkrecht auf dem Grundzustand. Wählen Sie die einparametrische Schar

$$\psi_\beta(x) = \left(\frac{4}{\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{m\omega\beta}{\hbar}\right)^{3/4} x e^{-m\omega\beta x^2/2\hbar}$$

von normierten und ungeraden Versuchsfunktionen im obigen Variationsprinzip und leiten Sie eine obere Schranke an E_1 her.

Bemerkung 1: Für $\beta = 1$ ist ψ_β der erste angeregte Zustand des harmonischen Oszillators.

Bemerkung 2: Bei der Minimierung werden Sie auf eine kubische Gleichung für β geführt. Diese ist bis auf eine Skalierung von λ identisch zu der in der Vorlesung diskutierten kubischen Gleichung bei der Anwendung des Variationsprinzips auf den Grundzustand. Benutzen Sie diese Tatsache.

Bei der Korrektur der Aufgabe wäre es hilfreich, wenn Sie (wie in der Vorlesung) den Parameter $\lambda_0 = m^2\omega^3/2\hbar$ einführen. Dann kann der Ausdruck für den Erwartungswert der Energie als Funktion von $\hbar\omega$, λ , λ_0 und β ausgedrückt werden.

Aufgabe : Bonus-Zusatzaufgabe

3 Punkte

Setzt man $\lambda' = \lambda/\lambda_0$ und misst die Energien in Einheiten von $3\hbar\omega/2$, d.h. der Energie des ersten angeregten Zustands des harmonischen Oszillators, dann findet man z.B. folgende numerischen Werte (diese sind nahezu exakt):

λ'	0	1/12	1/6	1/2	5/3
β^*	1	1.1651	1.2841	1.6001	2.1915
E_{var}	1	?	?	?	?
E_{num}	1	1.6313	1.7335	2.0260	2.6166

Was ergibt die Variationsrechnung mit obigen Versuchsfunktionen für die oberen Schranken E_{var} ?

Abgabetermin: Donnerstag, 21.04.2016, vor der Vorlesung