

**Übungsblatt 3**  
zur Vorlesung  
**"Theorie V - Höhere Quantenmechanik"**  
im Sommersemester 2016

Dozent: Univ.-Prof. Dr. Hartmut Wittig

Oberassistent: Andreas Risch

**Abgabe: Freitag, 13.05.2016, 10:00,**  
**im Foyer des Instituts für Kernphysik.**

**Bitte vermerken Sie die zur Bearbeitung benötigte Zeit auf Ihrer Abgabe.**

1. *Wiederholungsfragen*

- (a) (1 Punkt) Erläutern Sie die der zeitunabhängigen Störungstheorie zugrunde liegende Idee. Welche Form besitzt ein für die Anwendung der zeitunabhängigen Störungstheorie geeigneter Hamilton-Operator?
- (b) (1 Punkt) Erläutern Sie das Ritz'sche Variationsverfahren. Welche Forderung muss an den Hamilton-Operator gestellt werden? Welchen Vorteil bietet das Ritz'sche Variationsverfahren gegenüber der zeitunabhängigen Störungstheorie?

2. *Zwei Spin-1/2-Teilchen*

Wir betrachten ein System zweier Spin-1/2-Teilchen. Die Basis des Zweiteilchen-Hilbertraums  $\mathcal{H}^{(2)}$  sei durch die vier orthonormalen Zustände

$$|m_1 m_2\rangle = |m_1\rangle |m_2\rangle \text{ mit } m_{1,2} = \pm \frac{1}{2}$$

gegeben. Diese sind Eigenzustände der Spinoperatoren  $S_1^2$ ,  $S_2^2$ ,  $S_{1z}$  und  $S_{2z}$ . Der Transpositionsoperator  $P_{12}$  vertausche die beiden zugrundeliegenden Einzelteilchenzustände:

$$P_{12}|m_1 m_2\rangle = |m_2 m_1\rangle.$$

- (a) (3 Punkte) Überprüfen Sie explizit die in der Vorlesung gegebenen Relationen  $P_{12}^{-1} = P_{12}^\dagger = P_{12}$  und zeigen Sie, dass  $P_{12}$  lediglich die Eigenwerte  $\pm 1$  besitzt.
- (b) (2 Punkte) Zeigen Sie, dass die gemeinsamen Eigenzustände von  $S_1^2$ ,  $S_2^2$ ,  $S^2$  und  $S_z$  mit  $S = S_1 + S_2$  auch Eigenzustände zu  $P_{12}$  sind.
- (c) (2 Punkte) Zeigen Sie, dass  $P_{12} S_1 P_{12}^\dagger = S_2$  und  $P_{12} S_2 P_{12}^\dagger = S_1$  gelten.

Hinweis: Für die Leiteroperatoren gelten die Relationen

$$S_\pm = S_x \pm iS_y,$$
$$S_\pm |m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |m \pm 1\rangle.$$

3. *Ortho-Helium*

In Aufgabe 4 des Übungsblatts 2 haben Sie die Korrektur zur Grundzustandsenergie von Para-Helium berechnet.

- (a) (5 Punkte) Berechnen Sie nun die Korrektur zur Grundzustandsenergie von Ortho-Helium in erster Ordnung Störungstheorie mit  $L = 0$  und  $M_L = 0$ . Leiten Sie hierzu Ausdrücke in Form von Integralen über die Radialkoordinaten  $r_1$  und  $r_2$  her. Identifizieren Sie den Anteil der Coulomb- und den der Austausch-Wechselwirkung.

Hinweise:

Orientieren Sie sich an der Berechnung der Korrektur zur Grundzustandsenergie von Para-Helium. Die normierte Ortswellenfunktion  $\psi_{100}$  und  $\psi_{200}$  für das Ein-Elektron-Atom mit unendlich schwerem Kern mit Kernladungszahl  $Z$  lauten

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_B} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_B}\right),$$

$$\psi_{200}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_B} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{Zr}{2a_B}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a_B}\right),$$

wobei  $a_B$  der Bohrsche Radius ist.

#### 4. Para-Helium

In der Vorlesung wurde das Ritz'sche Variationsverfahren genutzt, um die Grundzustandsenergie von Para-Helium zu berechnen. Der Zwei-Elektronen-Hamilton-Operator wurde hierzu in  $H = H_0(Z_*) + \delta H(Z_*) + \Delta H$  zerlegt mit

$$H_0(Z_*) = \frac{(\vec{p}_1)^2}{2m} - \frac{Z_*e^2}{r_1} + \frac{(\vec{p}_2)^2}{2m} - \frac{Z_*e^2}{r_2}, \quad \Delta H = \frac{e^2}{\|\vec{x}_1 - \vec{x}_2\|},$$

$$\delta H(Z_*) = -\frac{(Z - Z_*)e^2}{r_1} - \frac{(Z - Z_*)e^2}{r_2}, \quad r_i = \|\vec{x}_i\| \text{ für } i = 1, 2.$$

- (4 Punkte) Stellen Sie das Ritz'sche Funktional auf und berechnen Sie die approximierte Energie des Grundzustands durch Variation des Minimierungsparameters  $Z_*$ . Für welchen Wert von  $Z_*$  wird das Funktional minimal?
- (1 Punkt) Welche Bedeutung hat der Minimierungsparameter  $Z_*$ ? Interpretieren Sie den ermittelten numerischen Wert.

Hinweise:

Die normierte Ortswellenfunktion des Grundzustands für das Ein-Elektron-Atom mit unendlich schwerem Kern mit Kernladungszahl  $Z$  mit Hamilton-Operator  $H^{(1)}$  lautet

$$\psi_{100}(r, Z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_B} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_B}\right), \quad H^{(1)} = \frac{(\vec{p})^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}, \quad r = \|\vec{x}\|$$

wobei  $a_B$  der Bohrsche Radius ist. Weiter gelten

$$\int d^3x_1 \int d^3x_2 |\psi_{100}(r_1, Z)|^2 |\psi_{100}(r_2, Z)|^2 \frac{e^2}{\|\vec{x}_1 - \vec{x}_2\|} = \frac{5Ze^2}{8a_B},$$

$$\int d^3x \psi_{100}(r, Z)^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{r} \right) \psi_{100}(r, Z) = -\frac{Z^2e^2}{2a_B}.$$

#### 5. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Fermionen im Fock-Raum

In der Vorlesung wurden die fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $a_\alpha$  und  $a_\alpha^\dagger$  eingeführt. Der zugrundeliegende Index  $\alpha$  sei diskret. Machen Sie von der Besetzungszahldarstellung Gebrauch.

- (4 Punkte) Zeigen Sie die Antikommutationsrelationen  $\{a_\alpha, a_\beta^\dagger\} = \delta_{\alpha\beta}$  und  $\{a_\alpha, a_\beta\} = \{a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger\} = 0$ .
- (2 Punkte) Berechnen Sie für den Besetzungszahloperator  $n_\alpha = a_\alpha^\dagger a_\alpha$  die Kommutatoren  $[n_\alpha, a_\beta^\dagger]$  und  $[n_\alpha, a_\beta]$ .