

- 3.1 *Zur Variationsmethode.* Es sei H der Hamilton-Operator eines quantenmechanischen Systems. Der Mittelwert seiner Energie,

$$E[\Phi] = \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}$$

ist ein Funktional der Zustände. Machen Sie sich klar, dass jeder Zustand, der dieses Funktional stationär läßt, auch die Schrödinger-Gleichung löst. Dabei ist der stationäre Wert des Funktionals genau der zugehörige Eigenwert.

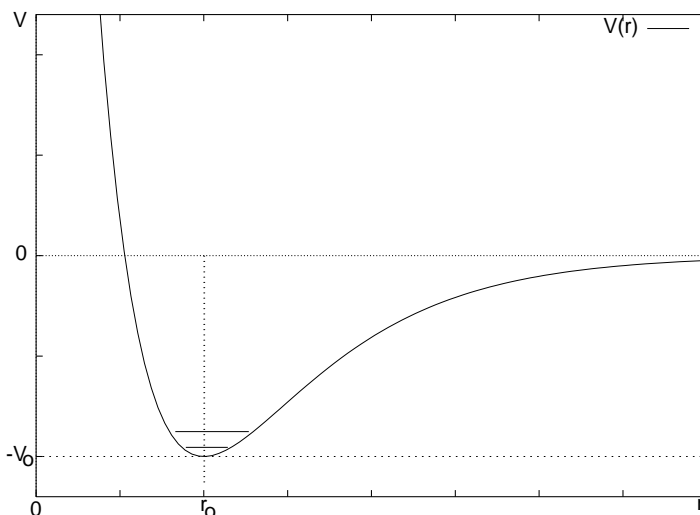
- 3.2 Weil es so schön war, nochmal *Grundzustand des Heliumatoms*. Bestimmen Sie den Grundzustand eines $(Z - 2)$ -fach ionisierten Atoms mit Hilfe der Variationsmethode. Die Variation erfolgt in einem ein-dimensionalen Unterraum des Hilbertraumes, der von der ein-parametrischen Schar von Wellenfunktionen

$$\Phi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\pi a^3} \exp\left(-\frac{r_1 + r_2}{a}\right)$$

aufgespannt wird. (Hinweis: Erinnern Sie sich an die Präsenzübung der letzten Woche!)

- (i) Wie verhält sich $\Phi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ zur Eigenfunktion nullter Näherung von letzter Woche?
- (ii) Bezeichne $\varphi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ die auf Eins normierte Wellenfunktion. Machen Sie sich klar, dass $\varphi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2)$ faktorisiert werden kann. Erkennen Sie, zu welchem Problem die Wellenfunktion ψ_a eine Eigenfunktion ist?
- (iii) Wie sind demnach Gesamtenergie, sowie kinetische und potentielle Energie von Elektronen mit Wellenfunktionen ψ_a gegeben?
- (iv) Den Hamilton-Operator kennen Sie schon von letzter Woche. Er zerfällt in fünf Anteile. Berechnen Sie die Erwartungswerte jeder dieser fünf Anteile. Für den Wechselwirkungs-Term der Elektronen untereinander können Sie das Ergebnis von letzter Woche recyklen. Wie ist also die Energie $E[\varphi_a]$ gegeben?
- (v) Finden Sie das Extremum von $E[\varphi_a]$ als Funktion von $Z' = a_0/a$. Vergleichen Sie das Resultat mit dem Ergebnis der Störungsrechnung von letzter Woche.
- (vi) Was ist die physikalische Bedeutung von Z' ?

- 3.1 *Vibrations- und Rotationsniveaus zweiatomiger Moleküle.* Die Born-Oppenheimer-Näherung besagt, dass die potentielle Energie $V(r)$ der Wechselwirkung zwischen den beiden Atomkernen nur von deren Abstand abhängt. Die beiden Kerne haben Massen m_1 und m_2 .



- (i) Zeigen Sie, dass der Hamilton-Operator dieses Problems in einen Anteil für die freie Bewegung eines Teilchens der Masse $M = m_1 + m_2$ am Ort des Schwerpunktes und einen Anteil für die Bewegung eines Teilchens der reduzierten Masse $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ im Potential $V(r)$ zerlegt werden kann. Zur Kontrolle: $H = H_{\text{CM}} + H_{\text{rel}}$ mit

$$H_{\text{CM}} = \frac{1}{2M} (\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)^2, \quad H_{\text{rel}} = \frac{1}{2\mu} \left(\frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{m_1 + m_2} \right)^2 + V(r).$$

2 P.

- (ii) Im Ruhesystem des Schwerpunktes braucht nur die relative Bewegung betrachtet zu werden. Diese hängt nur von r ab, so dass die stationären Zustände durch einen Ansatz $\varphi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{r} u_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$ beschrieben werden. Wie lautet die radiale Differentialgleichung für $u_{n,l}(r)$ zur Energie $E_{n,l}$?
- (iii) Entwickeln Sie $V(r)$ um das Minimum $V(r_0) = -V_0$ herum bis zu Termen zweiter Ordnung einschließlich. Betrachten Sie zunächst $l = 0$ und führen damit das Radialproblem auf den 1-dimensionalen harmonischen Oszillator zurück. Wie lauten also die Eigenwerte $E_{n,0}$ und die (normierten!) Eigenfunktionen $u_{n,0}$? (Hinweis: es ist zweckmäßig, die Abkürzung $\frac{\partial^2}{\partial r^2} V(r)|_{r=r_0} = v$ einzuführen.)
- (iv) Es sei nun $l > 0$. Man kann den Zentrifugalterm des effektiven Potentials in der Nähe von r_0 näherungsweise als konstant ansehen, d.h.

1 P.

2 P.

$$\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \approx Bhl(l+1), \quad B = \frac{\hbar}{4\pi\mu r_0^2}.$$

Wie ändert sich in dieser Näherung die radiale Differentialgleichung und wie lauten damit die Energie-Eigenwerte $E_{n,l}$?

1 P.

■ 3.2 *Ein einfaches Modell des Protons.* Schon vor der Entwicklung der Quantenchromodynamik der Quarks wiesen Experimente darauf hin, dass das Proton eine innere Struktur besitzt und aus “ungefähr” drei Teilchen besteht – dies führte damals zum sogenannten Partonen-Modell. Frühe theoretische Modelle zur Beschreibung der Wechselwirkung dieser drei Partonen miteinander legten nahe, dass die Partonen sich in erster Näherung in einem gemeinsamen Potential $V(r)$ bewegen.

- (i) Die Experimente legten auch nahe, dass die Partonen, wie das Proton selbst, Fermionen, d.h. Teilchen mit Spin $S = 1/2$ sind. Wie läßt sich also die Gesamtwellenfunktion des Grundzustandes ansetzen, wenn die Wechselwirkung der Spins sowie der Bahndrehimpuls vernachlässigt wird, die Partonen also alle im $1s$ Zustand sitzen? (Hinweis: in der Vorlesung kam ein analoges Problem mit zwei Teilchen vor. Die Wellenfunktion eines Spin-1/2 Teilchen bekommt einen zusätzlichen Anteil, den Spinor $\chi(s) = \langle s|\chi\rangle$, also $\Psi(\mathbf{r}, s) = \psi(\mathbf{r})\chi(s)$. Eine Basis der Zustände $|\chi\rangle$ ist durch $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ gegeben. Für den Spin-Anteil einer Wellenfunktion für zwei Teilchen schreibt man der Kürze halber gerne $|\uparrow\downarrow\rangle$ für $|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$ etc.) 1 P.
- (ii) Drei Spin-1/2 Teilchen können sich zu einem gemeinsamen Quantenzustand mit Spin $S = 3/2$ oder $S = 1/2$ kombinieren. Geben Sie für die vier Möglichkeiten $S_z \in \{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\}$ jeweils die vollständig symmetrisierten und vollständig antisymmetrisierten Wellenfunktionen an. 2 P.
- (iii) Das Proton ist selbst ein Spin-1/2 Teilchen. Die Gesamtwellenfunktion, die das Proton im Partonen-Modell beschreibt, muß antisymmetrisch sein. Zeigen Sie mit Ihrer obige Betrachtung, dass das Partonen-Modell so nicht vollständig sein kann, weil die antisymmetrisierten Wellenfunktionen identisch verschwinden. 1 P.
- (iv) Die Wellenfunktionen können nur durch Einführen eines weiteren Freiheitsgrades vollständig antisymmetrisiert werden. Nehmen Sie an, dass dieser zusätzliche Freiheitsgrad f diskret quantisiert ist. Wieviele verschiedene Werte muss f für ein Parton mindestens annehmen können, damit eine nichtverschwindende antisymmetrische Wellenfunktion für drei Partonen konstruiert werden kann? Das Proton selbst scheint bezüglich der Quantenzahl f neutral zu sein. Welche Gruppenstruktur könnte demnach in der Quantenzahl f verborgen sein? (Hinweis: Spin-1/2 Fermionen tragen eine $SU(2)$ Gruppenstruktur.) 2 P.

12 P.