

7. Übung zur Vorlesung Atom- und Molekülphysik (E4) SS2023

Besprechung in der Woche vom 19.6.

Aufgabe 21 Wasserstoff-ähnliche Systeme

Als wasserstoff-ähnlich kann man alle Systeme bezeichnen, bei denen sich ein geladenes Teilchen im Coulombpotential eines anderen, entgegengesetzt geladenen Objekts befindet.

- Besonders ähnlich zum Wasserstoffatom sind natürlich Deuterium und Tritium, bei welchen zusätzlich ein bzw. zwei Neutronen im Kern sind. Der Kern ist also deutlich schwerer als beim einfachen Wasserstoff. Wie wirkt sich das auf die Eigenenergien bzw. auf die emittierten Wellenlängen aus? Bestimmen Sie, um welche Faktoren sich diese Werte für Deuterium und Tritium von denen für Wasserstoff unterscheiden.
- Das Positronium ist ein exotisches Atom, bei dem das Proton mit dem Antiteilchen des Elektrons, das Positron e^+ , ausgetauscht wird. Dieses System kann auch mit dem entsprechend modifizierten Ansatz des Wasserstoffatoms beschrieben werden. Berechnen Sie die Ausdehnung (Bohrscher Radius) des Positroniums sowie die Energien des Grundzustands und der ersten beiden angeregten Zustände. Berechnen Sie die Wellenlängen der Übergänge zwischen Grundzustand und diesen angeregten Zuständen. Weshalb können neben den errechneten Wellenlängen auch Photonen im Gammastrahlenbereich gemessen werden?
- Ein Exziton ist ein gebundener Zustand von einem Elektron und einem Loch (einfach positiv geladene Fehlstelle) in einem Festkörper. Berechnen Sie auch hier die Ausdehnung des Exzitons im Halbleiter Galliumarsenid (GaAs) sowie die Energie des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands.

Hinweise: In GaAs haben das Elektron und das Loch effektive Massen von $m_e^* = 0.066 \cdot m_e$ und $m_h^* = 0.5 \cdot m_e$. Die relative dielektrische Permittivität ist $\epsilon_r = 13$.

Aufgabe 22 Sequentielle Messungen an Spin-1/2-Systemen

Wir betrachten ein Spin-1/2-System. Gegeben seien zwei Operatoren

$$\begin{aligned}\hat{A} &= a_1 |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + a_2 |\psi_2\rangle \langle \psi_2|, \\ \hat{B} &= b_1 |\phi_1\rangle \langle \phi_1| + b_2 |\phi_2\rangle \langle \phi_2|.\end{aligned}$$

Operator \hat{A} repräsentiert die Observable A und hat zwei Eigenzustände $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ mit den Eigenwerten a_1, a_2 . Entsprechendes gilt für den Operator \hat{B} (Observable B) mit Eigenzuständen $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$ und Eigenwerten b_1, b_2 . Zwischen den Eigenzuständen gelten die Beziehungen

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} (|\phi_1\rangle + 2|\phi_2\rangle), \quad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} (-2|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle).$$

- Zunächst wird die Observable A gemessen und man erhält den Wert a_1 . In welchem Zustand befindet sich das System (direkt) nach der Messung? Mit welcher Wahrscheinlichkeit erhalten Sie bei einer wiederholten Messung von A die Ergebnisse a_1 bzw. a_2 ?
- Nun wird die Observable B gemessen. Welche Ergebnisse kann man erhalten und mit welcher Wahrscheinlichkeit? Bestimmen Sie den Erwartungswert $\langle \hat{B} \rangle$.
- Danach werde wieder die Observable A gemessen. Wie hoch ist jetzt die Wahrscheinlichkeit, den Wert a_2 zu erhalten? Betrachten Sie die beiden Fälle:
 - das Ergebnis der vorherigen Messung von B ist b_1 ,
 - das Ergebnis der vorherigen Messung von B ist unbekannt.

Aufgabe 23 Grundzustand von Helium

Bei Mehrelektronen-Atomen ist die Schrödinger-Gleichung zu dem Hamiltonian \hat{H} nicht mehr exakt lösbar. Eine Methode, Näherungslösungen für den Grundzustand zu finden, ist die so genannte Variationsmethode. Hierbei nutzt man die Eigenschaft, dass für jede normierte „Testfunktion“ ϕ^c gilt: $\langle E \rangle = \langle \phi^c | \hat{H} | \phi^c \rangle \geq E_0$, wobei E_0 die Energie des Grundzustands ist. Um eine Näherung für den Grundzustand zu finden, wählt man eine geeignete Testfunktion ϕ^c mit einem freien Parameter c und minimiert den Energieerwartungswert $\langle E \rangle$ in Abhängigkeit von c (die Güte der Näherung ist von dem Ansatz abhängig). Diese Methode soll am Beispiel von Helium ausprobiert werden.

Der Hamilton-Operator für das Helium-Atom ist

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{V}_{12}, \quad \hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_i}, \quad \hat{V}_{12} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}.$$

Die Testfunktion sei definiert als

$$\phi^c := \psi_{1s}^c(1)\psi_{1s}^c(2)\chi_{12}.$$

Dabei bezeichnet $\psi_{1s}^c(i) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} c^{\frac{3}{2}} e^{-cr_i}$ den räumlichen Anteil der Wellenfunktion, während $|\chi_{12}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2)$ den Spin-Zustand der Elektronen beschreibt.

- Argumentieren Sie, warum dieser Ansatz für ϕ^c sinnvoll ist. Vergleichen Sie insbesondere ψ_{1s}^c mit der Wellenfunktion des Wasserstoffatoms.
- Stellen Sie c in Bezug zum Bohrschen Radius. Was kann man über die effektive Kernladungszahl aussagen?
- Zeigen Sie, dass für den Energieerwartungswert $\langle E \rangle$ gilt

$$\langle E \rangle = \left\langle \psi_{1s}^c(1) \left| \hat{H}_1 \right| \psi_{1s}^c(1) \right\rangle + \left\langle \psi_{1s}^c(2) \left| \hat{H}_2 \right| \psi_{1s}^c(2) \right\rangle + \left\langle \psi_{1s}^c(1)\psi_{1s}^c(2) \left| \hat{V}_{12} \right| \psi_{1s}^c(1)\psi_{1s}^c(2) \right\rangle.$$

- (optional für E4p)** Drücken Sie den Wert von $\langle E \rangle$ als Funktion des Parameters c aus.
- (optional für E4p)** Bestimmen Sie den Wert von c , bei dem $\langle E \rangle$ minimal wird. Welcher Wert für $\langle E \rangle$ ergibt sich?

Hinweise: für kugelsymm. Wellenfunktionen ist $\nabla_i^2 = \frac{d^2}{dr_i^2} + \frac{2}{r_i} \frac{d}{dr_i}$. Es gilt $\int_0^\infty dr \cdot e^{-b \cdot r} r^k = \frac{k!}{b^{k+1}}$.

Für den Erwartungswert $\langle \hat{V}_{12} \rangle$ ergibt sich $\left\langle \psi_{1s}^c(1)\psi_{1s}^c(2) \left| \hat{V}_{12} \right| \psi_{1s}^c(1)\psi_{1s}^c(2) \right\rangle = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{5}{8} e^2 c$.