1.2.2021

LMU – Fakultät für Physik

12. Übung zur Quantenmechanik (T2p) im WS 20/21

Prof. G. Buchalla

Aufgabe 1: (Laguerre Polynome)

Die assoziierten Laguerre Polynome, definiert durch

$$L_q^p(x) \equiv \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x), \qquad L_q(x) = e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^q \left(e^{-x} x^q\right)$$

tauchen bei der Lösung der radialen Schrödingergleichung des Wasserstoffatoms auf. Zeigen Sie, dass die Rekursionsformel

$$L_{n+l}^{2l+1}(2z) \propto \sum_{j=0}^{n-l-1} a_j z^j, \qquad a_{j+1} = \frac{2(j+l+1-n)}{(j+1)(j+2l+2)} a_j,$$

für alle möglichen Zustände mit $n = 2$ gilt. Bestimmen Sie die entsprechenden Proportionalitätskonstanten.

Aufgabe 2: (Helium-Atom)

In dieser Aufgabe untersuchen wir eine Methode zur Abschätzung der Grundzustandsenergie des Helium-Atoms.

a) Ritz'sches Variationsprinzip:

Ein physikalisches System sei durch einen Hamilton-Operator H charakterisiert. Zeigen Sie, dass der Erwartungswert von H in jedem beliebigen (normierten) Zustand ψ größer ist als die Bindungsenergie des Grundzustands E_0, d.h.

$$E_0 \leq \langle\psi|H|\psi\rangle$$

Das Ritz'sche Variationsprinzip besteht nun darin, einen Zustand $\psi(\lambda)$ als Funktion eines oder mehrerer Parameter λ zu wählen und das Minimum des Ausdrucks

$$E(\lambda) = \frac{\langle\psi(\lambda)|H|\psi(\lambda)\rangle}{\langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle}$$

zu suchen. Das Minimum von $E(\lambda)$ ist dann eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie.

b) Für das He-Atom machen wir einen Ansatz der Form

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; Z_{\text{eff}}) = \frac{Z_{\text{eff}}^3}{\pi a^3}\, e^{-Z_{\text{eff}}(r_1+r_2)/a}, \qquad a = \hbar/(m\alpha c)$$

und fassen Z_{eff} als einen freien Parameter auf, der bei der Abschätzung der Grundzustandsenergie variiert werden soll. Dies entspricht der Vorstellung, dass das attraktive Kernpotential für jedes Elektron durch die Coulomb-Abstoßung des anderen Elektrons effektiv abgeschirmt wird, so dass jedes Elektron einem Kernpotential mit $Z_{\text{eff}} < 2$ unterliegt.

Verwenden Sie das Variationsprinzip, um die Grundzustandsenergie des He-Atoms abzuschätzen.

Aufgabe 3: (Alkali-Atome)

Alkali-Atome können nährungsweise durch das Potential

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r}\left(1 + \frac{b}{r}\right)$$

beschrieben werden.

a) Zeigen Sie, dass die Form der Schrödingergleichung des Systems sich auf die des Wasserstoffatoms bringen läßt, wenn man

$$l \to \ell = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{2m}{\hbar^2}\alpha b}$$

ersetzt.

b) Für das Wasserstoffatom folgt die Energie des Bindungszustands aus der Voraussetzung

$$2(j_{max} + l + 1) \equiv 2n = \rho_0, \qquad \rho_0 = \frac{\alpha}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}$$

Wie sieht die Voraussetzung für Alkali-Atome aus? Bestimmen Sie damit die Energieeigenwerte (achten Sie darauf, dass ℓ keine ganze Zahl ist). Für das Wasserstoffatom sind die Energien in l entartet. Gilt das auch für Alkali-Atome?

c) Unter welchen Bedingungen sind die Energien reell? Entwickeln Sie die Energieformel für kleine b bis zur erster Ordnung.