

Aufgabenblatt 12  
Theoretische Physik 3 : QM SS2017  
Dozent : Prof. M. Vanderhaeghen

7.07.2017

**Aufgabe 1. (50 Punkte)**

Betrachte ein Quantensystem mit nur drei linear unabhängigen Zuständen. Der Hamilton-Operator sei in Matrixform gegeben durch

$$H = V_0 \begin{pmatrix} 1 - \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \epsilon \\ 0 & \epsilon & 2 \end{pmatrix},$$

wobei  $V_0$  eine Konstante ist und  $\epsilon$  eine kleine Zahl ( $\epsilon \ll 1$ ).

- a) (5 P.) Gebe die Eigenwerte und Eigenvektoren des ungestörten Hamiltonoperators  $H^0$  an ( $\epsilon = 0$ ).
- b) (10 P.) Bestimmen Sie die exakten Eigenwerte des Hamilton-Operators  $H$ . Entwickle diese als Potenzreihen in  $\epsilon$  bis zur zweiten Ordnung.
- c) (20 P.) Benutze Störungstheorie in erster und zweiter Ordnung für nicht entartete Systeme um den genäherten Eigenwert des Zustands, der aus dem Eigenvektor zum nicht entarteten Eigenwert von  $H^0$  entsteht, zu bestimmen. Vergleiche mit dem exakten Resultat aus b).
- d) (15 P.) Verwende Störungstheorie für entartete Systeme um die Korrekturen der zwei ursprünglich entarteten Eigenwerte in erster Ordnung zu bestimmen. Vergleiche mit dem exakten Resultat.

**Aufgabe 2. Das Heliumatom (50 Punkte)**

In dieser Aufgabe werden wir mithilfe der Störungstheorie schrittweise die Grundzustandsenergie des Heliumatoms ausrechnen. Das Heliumatom kann als ein System betrachtet werden, in dem sich zwei Elektronen um einen Kern der Ladung  $+2e$  bewegen. ( $e$  ist der Betrag der Ladung eines Elektrons). Die Wellenfunktion zur Beschreibung des Zustand des Systems im Koordinatenraum ist daher eine Funktion welche von den Koordinaten  $\vec{r}_1$  und  $\vec{r}_2$  abhängt:  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ .

- a) (10 P.) Gebe den Hamilton-Operator für dieses System unter Berücksichtigung der Coulombwechselwirkung der Elektronen sowohl mit dem Kern als auch untereinander (repulsiver Term) an.
- b) (10 P.) Wenn wir den repulsiven Term vernachlässigen, handelt es sich um ein Wasserstoffatom mit einer Kernladung von  $+2e$  statt  $+e$ . Bestimme die Grundzustandswellenfunktion in dieser Näherung und zeige, dass die zugehörige Energie  $E_{\text{He}}^{\text{g.s.}} \approx -109 \text{ eV}$  ist.
- c) (30 P.) Das Resultat für die Energie in der vorherigen Näherung unterscheidet sich deutlich vom experimentell bestimmten Wert von  $-79 \text{ eV}$ . Wir verbessern unsere Rechnung durch Verwendung der Störungstheorie. Berechne die Korrekturen erster Ordnung zur Grundzustandsenergie

$$E_{ee} = \langle \Psi_{\text{He}}^{\text{g.s.}} | H' | \Psi_{\text{He}}^{\text{g.s.}} \rangle$$

mit dem Repulsionsterm  $H' = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$  und vergleiche das korrigierte Resultat mit dem experimentellen Ergebnis.

*Hinweise zu c):*

- 1) Beschreibe das Integral in Kugelkoordinaten und reduziere es auf

$$E_{ee} = \frac{64}{a^6} \frac{8e^2}{4\pi\epsilon_0} \int dr_1 r_1 e^{-4r_1/a} \int dr_2 r_2 e^{-4r_2/a} ((r_1 + r_2) - |r_1 - r_2|),$$

hierbei ist  $a$  der Bohrradius.

- 2) Löse das Integral unter Beachtung der Fälle  $r_1 > r_2$  und  $r_2 > r_1$  um das Resultat von

$$E_{ee} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{5}{4a}.$$

- 3) Setze die numerischen Werte ein und bestimme die korrigierte Grundzustandsenergie in eV.