

8. Tutorium - VU Quantentheorie 1 - 28.11.2008

1. Betrachten Sie ein zweiatomiges Molekül dessen Atome gegeneinander schwingen (sh. Skizze). Bei kleinen Amplituden können diese Schwingungen durch ein harmonisches Oszillatorpotential der folgenden Form modelliert werden,

$$V(x) = \frac{1}{2} (x - x_0)^2, \quad (1)$$

wobei x den Abstand der beiden Atomkerne zueinander angibt. Die Gleichgewichtsposition x_0 und die "Federkonstante" werden durch die kovalente Bindung der Elektronen (vgl. mit Bsp. 1 aus dem 3. Tutorium) sowie durch die Abstoßung der beiden Atomkerne bestimmt und können als bekannt vorausgesetzt werden.

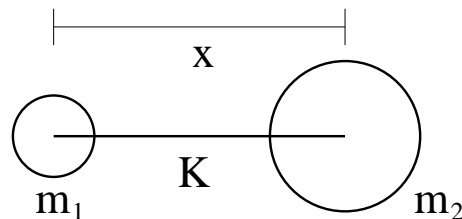


Abbildung 1: Zweiatomiges Molekül.

- Zeigen Sie wie die klassische Schwingungsfrequenz ν des Moleküls mit der Konstante K und der reduzierten Masse des Systems zusammenhängt.
- Berechnen Sie die Grundzustandsenergie der Vibrationen (in eV), wenn Sie annehmen, dass es sich bei dem Molekül um Kohlenmonoxid mit $K = 1860 \text{ N/m}^2$ handelt.
- Berechnen Sie die Energiedifferenz zwischen dem ersten angeregten Vibrationszustand und dem Grundzustand (in eV). In welchem Wellenlängen- und Frequenzbereich befindet sich die Strahlung, die durch einen entsprechenden Übergang im Molekül entsteht?
- Der Abstand x der beiden Atomkerne wird im Grundzustand der Vibrationsbewegung gemessen. Bestimmen Sie (durch numerische

Integration) die Wahrscheinlichkeit dafür, dass \hat{x} größer ist als klassisch erlaubt.

2. Zeigen Sie durch explizite Berechnung (im Ortsraum), dass für die Energieeigenzustände des harmonischen Oszillators $|n\rangle$ folgende Beziehungen gelten:

$$(a) \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (\text{Gl. 4.54}),$$

$$(b) \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (\text{Gl. 4.56}).$$

Stellen Sie dazu den Aufsteiger \hat{a}^\dagger (Absteiger \hat{a}) als Linearkombination des Orts- und Impulsoperators dar (sh. Gl. 4.36 und Gl. 4.35 im Skriptum) und entnehmen Sie die Ortsdarstellung der Energieeigenzustände $\langle x|n\rangle$ Gl. 4.31 aus dem Skriptum. Verwenden Sie in Ihrer Rechnung folgende Relationen (am besten unter Beibehaltung der reduzierten Koordinate $y = \hat{x}/\hat{x}_0$),

$$x_{n+1}(y) = 2y x_n(y) - 2n x_{n-1}(y), \quad x_n(x) = 2n x_{n-1}(x). \quad (2)$$

3. Im 8. Plenumsbeispiel wurde Ihnen gezeigt wie Sie mithilfe der Heisenbergschen Unschärferelation und einer Energieminimierung (“Variationsprinzip”) die Grundzustandsenergie und den effektiven Radius des Wasserstoffatoms abschätzen können. In diesem Beispiel sollen Sie nun eine entsprechende Abschätzung für die Grundzustandsenergie von Helium durchführen. Nehmen Sie zur Bestimmung der jeweiligen Orts- und Impulsunschärfen der beiden Helium-Elektronen vorerst an, dass die Elektronen unabhängig voneinander mit dem Kern ($Z = 2$) wechselwirken. Zur Bestimmung der Gesamtenergie der Elektronen (die Kernbewegung kann vernachlässigt werden) komme allerdings noch folgende Abschätzung für die Wechselwirkungsenergie zwischen den beiden Elektronen dazu: $e^2/(r_1 + r_2)$. Mit r_1, r_2 sind hier die Radien der “Lokalisierungsregionen” von Elektron 1 bzw. Elektron 2 bezeichnet. Bei der Minimierung der Energie $E(r_1, r_2)$ für den Grundzustand können Sie annehmen, dass r_1 und r_2 völlig symmetrische Rollen spielen. Vergleichen Sie Ihr Endergebnis mit dem experimentellen Wert für die Grundzustandsenergie von Helium, der bei -79eV liegt.