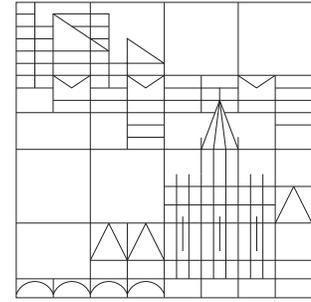


UNIVERSITÄT KONSTANZ
 Fachbereich Physik
 Prof. Dr. Guido Burkard
 Dr. Stefan Gerlach
<http://tinyurl.com/physik4>



**Physik IV: Integrierter Kurs (Theoretische Physik)
 Sommersemester 2011 - Übungsblatt 12**

Ausgabe: 06.07.2011, Abgabe: 13.07.2011, Übungen: 15.07.2011

Aufgabe 30: Vershobener harmonischer Oszillator (schriftlich - 8 Punkte)

Wirkt auf ein Teilchen, welches sich im Potential eines harmonischen Oszillators bewegt, eine konstante Kraft F (z.B. durch ein konstantes elektrisches Feld $\mathcal{E} : F = q\mathcal{E}$), so lautet die stationäre Schrödingergleichung in Ortsdarstellung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 - Fx \right) \psi_n(x) = E_n \psi_n(x).$$

- a) (3 Punkte) Berechnen Sie die Energieverschiebung gegenüber dem ungestörten harmonischen Oszillator in erster und zweiter Ordnung Störungstheorie.
- b) (5 Punkte) Bestimmen Sie die Eigenfunktionen ψ_n und die Energieeigenwerte E_n für dieses Problem indem Sie es auf ein bekanntes Problem zurückführen und vergleichen Sie mit dem Ergebnis von Aufgabenteil a).

Hinweis: Ersetzen Sie x durch eine Variable \tilde{x} so dass sich der Hamiltonoperator auf einen bekannten Hamiltonoperator zurückführen lässt:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 - Fx = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 \tilde{x}^2 + const.$$

Aufgabe 31: Ritzsches Variationsverfahren

Ein Hamiltonoperator H habe den nichtentarteten Grundzustand ψ_0 zur Energie E_0 und den ersten angeregten Zustand ψ_1 zur Energie $E_1 > E_0$.

- a) (2 Punkte) Zeigen Sie, dass folgendes Variationsprinzip gilt:

(i)

$$E_0 = \min_{\psi \in \mathcal{H}} \{ \langle \psi | H | \psi \rangle \mid \langle \psi | \psi \rangle = 1 \}$$

(ii)

$$E_1 = \min_{\psi \in \mathcal{H}} \{ \langle \psi | H | \psi \rangle \mid \langle \psi | \psi \rangle = 1, \langle \psi_0 | \psi \rangle = 0 \}$$

Das Rayleigh-Ritz'sche Näherungsverfahren beruht darauf, eine Form für den Grundzustand als Funktion von Parametern a_1, a_2, \dots, a_N , also $\psi(x) = \psi(x, a_1, \dots, a_N)$, anzusetzen und durch Minimierung von $E(a_1, \dots, a_N) = \langle \psi | H | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ eine optimale Funktion ψ und eine Abschätzung für E_0 zu bestimmen.

b) (3 Punkte) Betrachten Sie das Dreieckspotential in einer Dimension:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ Fx & x > 0 \end{cases}$$

Mit dem Variationsansatz $\psi(x) = xe^{-ax}$ bestimme man das optimale a und die Näherung für E_0 .
Hinweis: $\int_0^\infty x^n e^{-x} dx = n!$ ($n \in \mathbb{N}$).

c) (3 Punkte) Betrachten Sie das anharmonische Potential $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \lambda x^3$. Bestimmen Sie mit Hilfe des Variationsansatzes $\psi(x) = e^{-(x-a)^2/2}$ (verschobene Gaussfunktion) den optimalen Parameter a . Erklären Sie das Versagen der Methode für bestimmte Werte von λ .

Aufgabe 32: Hybridisierung

Aufgrund der Linearität der Schrödingergleichung (für das Wasserstoffatom) sind nicht nur die Eigenzustände des Wasserstoffatoms Lösungen zu einer festen Energie, sondern auch beliebige Linearkombinationen von Zuständen mit gleichem Energieeigenwert. In Molekülen ist es jedoch möglich, dass Linearkombinationen der reinen Wellenfunktionen, sog. *Hybridorbitale*, energetisch günstiger sind und damit im Grundzustand auftreten.

Die Form des Methanmoleküls CH_4 lässt sich mit der Hybridisierung der $2s$ - und $2p$ -Wellenfunktionen des Kohlenstoffs verstehen. Die für $n = 2$ möglichen Hybridwellenfunktionen sind

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{2} (\psi_{2s} + \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z}) \\ \psi_2 &= \frac{1}{2} (\psi_{2s} + \psi_{2p_x} - \psi_{2p_y} - \psi_{2p_z}) \\ \psi_3 &= \frac{1}{2} (\psi_{2s} - \psi_{2p_x} + \psi_{2p_y} - \psi_{2p_z}) \\ \psi_4 &= \frac{1}{2} (\psi_{2s} - \psi_{2p_x} - \psi_{2p_y} + \psi_{2p_z}) \end{aligned}$$

mit den orthonormierten Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms ($\psi_{n,l,m}$)

$$\begin{aligned} \psi_{2s} &= \psi_{2,0,0} \\ \psi_{2p_x} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,-1} - \psi_{2,1,1}) \\ \psi_{2p_y} &= \frac{i}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,-1} + \psi_{2,1,1}) \\ \psi_{2p_z} &= \psi_{2,1,0} \end{aligned}$$

a) Zeigen Sie, dass die Hybridwellenfunktionen orthonormiert sind und alle den gleichen Energieeigenwert haben, wenn der Energieunterschied zwischen s - und p -Orbitalen vernachlässigt wird (l -Entartung).

b) Berechnen Sie für ψ_1 und ψ_2 die Richtung maximaler Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte.

Hinweis: Verwenden sie kartesische Koordinaten und stellen Sie Beziehungen zwischen den einzelnen Koordinaten auf.

c) Bestimmen Sie anhand der in b) ermittelten Ortsvektoren den sog. Tetraederwinkel des Methanmoleküls von etwa $109,5^\circ$.