Übungsblatt 10 (2. und 3. Juli)

1 Anwesenheitsübung:

1.1 Potentialkasten und Störung

Betrachten Sie den unendlichen Potentialkasten mit Wänden bei $x = 0$ und $x = a$ und der zusätzlichen Störung

$$V_1(x) = \lambda \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \begin{cases} sin^2(\frac{\pi x}{a}) & , 0 < x < a \\ 0 & , sonst \end{cases}$$

Berechnen Sie störungstheoretisch die Eigenfunktionen bis zur Ordnung λ und die Eigenwerte bis zur Ordnung λ^2.

2 Hausaufgaben: Abgabe 8. Juli 2009 (30 Punkte)

Dies sind die letzten “regulären” Hausaufgaben. Für jene Studenten die das Punktekriterium knapp verfehlen, wird es ein paar zusätzliche Aufgaben geben um den Punktestand noch zu verbessern.

2.1 Störungsrechnung (10 Punkte)

Ein System werde durch die folgende Hamilton-Matrix beschrieben:
$\begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix}$ mit $|a|, |b| \ll |E_2 - E_1|$
Die Matrixelemente a und b werden als Störung von gleicher Grössenordnung betrachtet. Berechnen Sie die Eigenwerte von H mit Hilfe der Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung in den Störtermen. Vergleichen Sie die Resultate mit der exakten Lösung.

2.2 Hubbard Modell (10 Punkte)

Betrachten Sie als Modell für das Wasserstoffmolekül zwei Plätze (die einem Orbital um jeweils einen Kern entsprechen) und zwei Elektronen, die sich auf die Plätze setzen können. Das Hüpfen von einem Platz zum anderen soll die Energie t erbringen, das Setzen zweier antiparalleler Spins auf demselben Platz soll die Energie U kosten.

2.1. Begründe, warum das obige System folgenden Hamiltonoperator hat:
$H = -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (c^\dagger_{1\sigma} c_{2\sigma} + c^\dagger_{2\sigma} c_{1\sigma}) + U \sum_{i=1}^{2} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow},\ n_{i\sigma} = c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma}$

2.2. Warum kommutiert H mit dem Teilchenzahloperator $N = \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma}$?

2.3. Wegen (2) ist H in der Teilchenzahl diagonal. Wieviele Zustände mit 0,1,2 Teilchen gibt es? Schreibe H als Matrix in dieser Basis. Warum verschwindet H auf Zuständen, wo beide Plätze mit parallelem Spin besetzt sind, d.h. $H|\uparrow,\uparrow\rangle = 0$?

2.4. In den uns interessierenden Zweiteilchenzuständen hat H eine weitere Blockform und nur die Matrix in $\{|\uparrow,\downarrow\rangle,\ |\downarrow,\uparrow\rangle,\ |\uparrow\downarrow,-\rangle,\ |-,\uparrow\downarrow\rangle\}$ ist nicht trivial. Berechne die eigenwerte dieser Matrix und die zugehörigen Eigenzustände.

2.5. Wir wollen $U \gg t$ annehmen. Zeige, dass damit die Eigenwerte aus (4) lauten:
$\{-\frac{4t^2}{U},\ 0,\ U,\ U + \frac{4t^2}{U}\}$
und damit zwei Paare bilden, die leicht aufgspalten sind.

2.6. Zeige, dass bei den zugehörigen Eigenzuständen das Singlett, d.h. der antisymmetrische Zustand wie $|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle$, immer energetisch tiefer liegt als das “Triplett” d.h. der symmmetrische Zustand (es gibt allerdings nur einen Zustand, nicht drei).

2.3 Störungsrechnung Wasserstoffatom (10 Punkte)

Der Kern des Wasserstoff ist keine Punktladung; vereinfacht kann er als homogen geladene Kugel (Radius $R \approx 1fm$) aufgefasst werden. Begründen Sie den Ansatz:
$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}(\frac{r^2}{2R^2} - \frac{3}{2}) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r}$ mit $r < R$ ansonsten ist $V(r) = 0$

für das Störpotential. Welche Änderung der Energie ergibt sich dadurch für die $n = 1$ und $n = 2$ Zustände in erster Ordnung Störungsrechnung?
Weil $R/a_0 \approx 10^{-5}$ (a_0 : Bohrscher Radius) reicht es vollkomen die auftretenden Integrale nur bis zur führenden nichtverschwindenen Ordnung R/a_0 auszuwerten.