Übungen QM I Vorbereitungskurs

Blatt 5

Das Wasserstoffion (H_2^+)
Betrachten Sie ein ionisiertes H_2 Molekül. Ein einziges Elektron bewegt sich im attraktiven Potenzial zweier Protonen an den Positionen $\vec{X}_A$ und $\vec{X}_B$. Die Hamilton-Funktion für das Elektron lautet:

$$H = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{x}-\vec{X}_A|} - \frac{e^2}{|\vec{x}-\vec{X}_B|} + \frac{e^2}{|\vec{X}_B-\vec{X}_A|} \tag{1}$$

Als Ansatz für dieses Problem soll die Superposition von $1s$ Wellenfunktionen betrachtet werden:

$$\begin{aligned} \psi &= C_A\phi_A(\vec{x}) + C_B\phi_B(\vec{x}) && (2) \\ \text{mit:} & \\ \phi_{A,B}(\vec{x}) &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\exp\left(-\frac{|\vec{x}-\vec{X}_{A,B}|}{a}\right) && (3) \end{aligned}$$

wobei $a = 5,3\cdot 10^{-11}$m den Bohrradius bezeichnet. Außerdem gilt für den Abstand beider Kerne $|\vec{X}_B - \vec{X}_A| = R$.
(a) Mithilfe der Variationsmethode soll der Erwartungswert der Hamilton-Funktion (vgl 1) bezüglich der Parameter C_A und C_B minimiert werden. Es gilt:

$$\epsilon \equiv \langle H\rangle \equiv \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{4}$$

Zeigen Sie, dass die Bedingung zur Minimierung folgendermaßen lautet:

$$(H_{AA}-\epsilon)(H_{BB}-\epsilon) - |H_{AB} - S\epsilon|^2 = 0 \tag{5}$$

$$\begin{aligned} \text{mit:} & \\ H_{XY} &= \langle\phi_X|H|\phi_Y\rangle && (6) \\ S &= \langle\phi_A|\phi_B\rangle && (7) \end{aligned}$$

Hinweis: Betrachten C_X^* und C_X als unabhängige Variablen.
(b) Berechnen Sie die Integrale H_{AB}, H_{AA}, H_{BB} und S mit Hilfe von elliptischen Koordinaten.
Hinweis:

$$\begin{aligned} (x,y,z) &\rightarrow (\mu,\gamma,\phi) \in ([1,\infty[;[-1,1];[0,2\pi[) && (8) \\ \text{mit:} & \\ x &= \frac{R}{2}\cos\phi\sqrt{(\mu^2-1)(1-\gamma^2)} && (9) \\ y &= \frac{R}{2}\sin\phi\sqrt{(\mu^2-1)(1-\gamma^2)} && (10) \\ z &= -\frac{R\mu\gamma}{2} && (11) \end{aligned}$$

(c) Zeigen Sie, dass der Grundzustand zwei mögliche Energien besitzt:

$$\langle H\rangle_\pm \equiv \epsilon_\pm(R) = (1\pm S)^{-1}\left[E_1 + \frac{e^2}{R}\left(1+\frac{R}{a}\right)\exp\left(-2\frac{R}{a}\right) \pm \left(E_1 + \frac{e^2}{R}\right)S \mp \frac{e^2}{a}\left(1+\frac{R}{a}\right)\exp\left(-\frac{R}{a}\right)\right] \tag{12}$$

wobei $E_1 = 13,6$eV der Grundzustand des Wasserstoffatoms ist.
Zeigen Sie außerdem, dass für

$$\psi_\pm = C_\pm(\phi_A(\vec{x}) \pm \phi_B(\vec{x})) \tag{13}$$

Grundzustandswellenfunktionen $C_\pm$ gegeben ist durch:

$$C_\pm^2 = \frac{1}{2\pm 2S(R)} \tag{14}$$