

Quantenmechanik II. Übung 10.

FS 11

Abgabe: Di 10. Mai 2011

1. Variationsrechnung für das H_2^+ -Ion

Ziel der Aufgabe ist die quantenmechanische Begründung der chemischen Bindung, illustriert anhand eines einfachen Beispiels.

Zwei Protonen A , B befinden sich in den ruhenden Positionen \vec{R}_A , \vec{R}_B . Der Hamiltonoperator für das Elektron mit Koordinaten \vec{x} sei

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{R}_A|} - \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{R}_B|} + \frac{e^2}{|\vec{R}_A - \vec{R}_B|}.$$

Als Variationsansatz wähle man

$$|\pm\rangle = |A\rangle \pm |B\rangle,$$

wobei $|A\rangle$, $|B\rangle$ bei \vec{R}_A , bzw. \vec{R}_B zentrierte $1s$ Wasserstoffwellenfunktionen sind, d.h.

$$\langle \vec{x} | A \rangle = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-|\vec{x} - \vec{R}_A|/a_0}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Man berechne den Erwartungswert

$$\varepsilon_{\pm}(R) = \frac{\langle \pm | H | \pm \rangle}{\langle \pm | \pm \rangle}$$

als Funktion von $R = |\vec{R}_A - \vec{R}_B|$ und zeichne dessen Verlauf durch numerische Auswertung. Man bestimme daraus eine Näherung für die Bindungsenergie und den interatomaren Abstand des H_2^+ -Ions.

Hinweis: Die auftretenden Integrationen kann man in elliptischen Koordinaten ausführen:

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{|\vec{x} - \vec{R}_A| + |\vec{x} - \vec{R}_B|}{R}, \\ \eta &= \frac{|\vec{x} - \vec{R}_A| - |\vec{x} - \vec{R}_B|}{R}, \\ \varphi &= \text{Azimut um die } (\vec{R}_A - \vec{R}_B)\text{-Achse.} \end{aligned}$$

Dann ist

$$\int d^3x f(\vec{x}) = \frac{R^3}{8} \int_1^\infty d\xi \int_{-1}^1 d\eta \int_0^{2\pi} d\varphi (\xi^2 - \eta^2) f(\xi, \eta, \varphi).$$