

Prof. Dr. Andreas Knorr
 Dr. Carsten Weber
 Dipl. Phys. Alexander Carmele
 Dipl. Phys. Ken Lichtner

5. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Fr. 26.11.2010 12:00 Uhr im Briefkasten am Ausgang des ER-Gebäudes

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 13 (5 Punkte): Coulomb-Integral

Sowohl für die Berechnung der Grundzustands-Energiekorrektur des Helium-Atoms durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung mittels Störungstheorie als auch für die Variationsrechnung in Aufgabe 14 wird das Coulombintegral J_{1s1s} benötigt. Zeigen Sie, dass für dieses gilt:

$$J_{1s1s} = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, Z_{\text{eff}})|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3r_1 d^3r_2 = \frac{5}{8} \frac{Z_{\text{eff}}}{a_0}.$$

Verwenden Sie hierbei die in Aufgabe 14 definierte Wellenfunktion Ψ .

Tipp: Zeigen und verwenden Sie $\int_1^{-1} \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 x}} dx = -\frac{2}{\max(r_1, r_2)}$.

Aufgabe 14 (7 Punkte): Variationsverfahren für Helium-Grundzustand

Wir betrachten ein Helium-Atom, d.h. ein System aus zwei Elektronen mit den Ortskoordinaten \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 und einem Kern der Ladung $Z = 2$ am Ort $\mathbf{R} = 0$. Der Hamilton-Operator der zwei Elektronen sei gegeben durch

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}(\Delta_1 + \Delta_2) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{Z}{|\mathbf{r}_1|} - \frac{Z}{|\mathbf{r}_2|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right).$$

Um die Grundzustands-Wellenfunktion des Helium-Atoms näherungsweise zu bestimmen, benutzen wir den folgenden Ansatz:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, Z_{\text{eff}}) = \psi_{100}(\mathbf{r}_1, Z_{\text{eff}})\psi_{100}(\mathbf{r}_2, Z_{\text{eff}}),$$

wobei

$$\psi_{100}(\mathbf{r}, Z_{\text{eff}}) := 2 \left(\frac{Z_{\text{eff}}}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Z_{\text{eff}}}{a_0} |\mathbf{r}|} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

die Grundzustands-Wellenfunktion eines Elektrons im Feld eines Kernes mit Ladung Z_{eff} ist.

- (a) Zeigen Sie (unter Verwendung des Ergebnisses von Aufgabe 13), dass die Variation des Parameters Z_{eff} (effektive Kernladung) nach dem Ritzschen Variationsverfahren (Minimierung des Energieerwartungswertes für einen Satz von Testfunktionen zur Approximierung der Grundzustandsenergie, siehe Tutorium) zu einem Extremum bei $Z_{\text{eff}} = Z - 5/16$ führt und daraus der Näherungswert

$$E_g = \min \left(\frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = \left(-2Z^2 + \frac{5}{4}Z - 2 \left(\frac{5}{16} \right)^2 \right) \text{Ry}$$

für die Grundzustandsenergie des Helium-Atoms folgt ($1 \text{ Ry} \approx 13.6 \text{ eV}$).

- (b) Berechnen Sie (mit Hilfe von Aufgabe 13) die Grundzustands-Energiekorrektur des Helium-Atoms durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in 1. Ordnung Störungstheorie. Vergleichen Sie diesen Wert mit dem Ergebnis aus der Variationsrechnung und dem experimentellen Wert $E_g = -78.975 \text{ eV}$.

5. Übung TPV WS10/11

- (c) Wie lässt sich anschaulich erklären, dass der Wert von Z_{eff} gegenüber der Kernladung $Z = 2$ des Helium-Atoms reduziert ist?
- (d) Wie muss die Spin-Funktion der zwei Elektronen aufgrund der Symmetrie der Ortswellenfunktion lauten?

Aufgabe 15 (8 Punkte): Hundsche Regeln

In Atomen mit mehreren Elektronen führt die Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen zu einer energetischen Aufspaltung der Zustände mit gleicher Hauptquantenzahl n (d.h. innerhalb von Schalen) und gleicher Nebenquantenzahl l . Die energetische Reihenfolge von verschiedenen Elektronenkonfigurationen in Abhängigkeit der weiteren Quantenzahlen folgt aus den Coulombintegralen und kann in Form der Hundschen Regeln zusammengefasst werden.

- (a) Konstruieren Sie mit Hilfe der Hundschen Regeln die Grundzustands-Elektronenkonfigurationen der ersten zehn Elemente ($Z=1..10$). Stellen Sie dazu tabellarisch dar, in welchem Zustand (n, l, m_l, m_s) sich die einzelnen Elektronen befinden, und geben Sie zusätzlich die Orbitalbesetzungen in der Form $1s^2 2s$ (=Be) an. Erläutern Sie für Kohlenstoff ($Z = 6$), welche Regeln angewandt wurden.
- (b) Geben Sie für Kohlenstoff die Terme (also z.B. 3P_1) aller möglichen Zustände des $2p^2$ Orbitals in energetisch aufsteigender Reihenfolge an. Erklären Sie Ihr Ergebnis.