

8. Übungsblatt zur Theoretischen Physik II

Atome

Abgabe: Montag, 18. Dezember 2006 bis 13:00 Uhr in den Briefkasten im Physik-Altbau.

Aufgabe 20 (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 als:

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

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

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

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-Wellenfunktionen eines Elektrons im Feld eines Kernes mit Ladung Z_{eff} ist.

1. Zeigen Sie (unter Verwendung des Ergebnisses von Aufgabe 21), 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 Tutorien.) 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 ($1 \text{ Ry} \approx 13.6 \text{ eV}$).

2. Vergleichen Sie diesen Wert mit dem Ergebnis aus der Störungstheorie erster Ordnung (VL vom 1.12.2006) und dem experimentellen Wert $E_g = -78.975 \text{ eV}$.
3. Wie lässt sich anschaulich erklären, dass der Wert von Z_{eff} gegenüber der Kernladung $Z = 2$ des Helium-Atoms reduziert ist?
4. Wie muss die Spin-Funktion der zwei Elektronen aufgrund der Symmetrie der Ortswellenfunktion lauten?

Aufgabe 21 (5 Punkte): Coulomb-Integral

In der Vorlesung wurde die Energiekorrektur für den Grundzustand des Helium-Atoms durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung mittels Störungstheorie ermittelt. Sowohl bei jener Herleitung als auch für die Variationsrechnung aus Aufgabe 20 wird das Coulombintegral J_{1s1s} benötigt. Zeigen Sie, dass für dieses gilt:

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

Verwenden Sie die in Aufgabe 20 definierte Wellenfunktion Ψ .

Tipp: Zeigen und verwenden Sie $\int_1^{-1} \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2x}} dx = \frac{2}{\max(r_1, r_2)}$.

Aufgabe 22 (8 Punkte): *Hundsche Regeln*

In (mehr-elektronigen) Atomen 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.

1. 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.
2. Geben Sie für Kohlenstoff die Terme (also z.B. 3P_1) aller möglichen Zustände des $2p^2$ Orbitals in energetisch aufsteigender Reihenfolge an.

- **Internetseite der Veranstaltung:** <http://www.itp.tu-berlin.de/tpii-ws06.html>

- **Vorlesung:** Mittwoch 12:15 - 14:00 Uhr und Freitag 10:15 - 12:00 Uhr im PN 203

- **Ergänzungen zur Quantenmechanik:** Vorlesung von Prof. Muschik, mittwochs von 8:30 bis 10:00 Uhr im Raum P 164

- **Literatur:**

- U. Scherz, Quantenmechanik - Eine kompakte Einführung (Teubner, 2005)
- R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, Feynman Vorlesungen über Physik, Band 3, Quantenmechanik (Oldenburg, 2001)
- W. Nolting, Grundkurs Theoretische Physik 5/1 und 5/2 (Springer, 2002)
- F. Schwabl, Quantenmechanik (Springer 1993)
- C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, Quantenmechanik 1 und 2 (de Gruyter 1999)

- **Tutorien:**

- Dienstag 8:15 - 10:00 Uhr im P-N 229 (Jan Schlesner)
- Mittwoch 10:15 - 12:00 Uhr im P-N 246 (Janis Nötzel)
- Mittwoch 14:15 - 16:00 Uhr im P-N 226 (Janis Nötzel)
- Donnerstag 12:15 - 14:00 Uhr im P-N 114 (Jens Förstner)
- Freitag 12:15 - 14:00 Uhr im P-N 226 (Philipp Zedler)

- **Scheinkriterien:** 50% der Punkte aus den Übungszetteln, aktive Teilnahme an den Tutorien und bestandene Klausur

- **Sprechstunden:**

- Prof. Dr. A. Knorr Di, 13 - 14 Uhr im P-N 742
- Jan Schlesner Do, 13:30-14:30 Uhr im P-N 627
- Philipp Zedler Mi, 11-12 Uhr im P-N 711
- Janis Nötzel Fr, 14-15 Uhr im MA 723
- Jens Förstner Mi, 15-16 Uhr im P-N 152

- **Klausur:** Mittwoch, 7. Februar 2007, 12:00 - 14:00. Raum wird noch bekannt gegeben.

- **Mathematica-Kurs:** <http://www.physik.tu-berlin.de/pcpool/kurse/mathematica/>