

Prof. Dr. Sabine Klapp
 Dr. Judith Lehnert,
 Dr. Marten Richter,
 Dr. Torben Winzer

7. Übungsblatt – Quantenmechanik II

Abgabe: Do. 10. Dezember 2015 bis 8:30 Uhr im Hörsaal

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden **Zwischenschritte** und **ausführliche Kommentare** zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es Punkte! Die Abgabe soll in 3er-Gruppen erfolgen. Bitte geben Sie Ihre Namen, Matrikelnummern und die Übung an!

Aufgabe 1 (7 Punkte): Variationsverfahren für Helium-Grundzustand (5+1.5+0.5=7 Punkte)

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, dass die Variation des Parameters Z_{eff} nach dem Ritz'schen Variationsverfahren 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 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 $E_g = -78.975 \text{ eV}$.
- (c) Wie lässt sich anschaulich erklären, dass der Wert von Z_{eff} gegenüber der Kernladung $Z = 2$ des Helium-Atoms reduziert ist?

Nützliche Integrale

$$\int_0^\infty r^n e^{-ar} dr = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

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

Aufgabe 2 (10 Punkte): *Hartree-Fock-Theorie im Potentialkasten*

Bei der Hartree-Fock (HF) Approximation zur Berechnung von Wellenfunktionen von Vielteilchenproblemen wird der Grundzustand des N Teilchen Hamiltonoperator $H = \sum_{i=1}^N T_i + \sum_{i<j}^N v(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|)$ mit $T_i = -\hbar^2/(2m)\nabla_i^2$ geschrieben als eine einzelne Slaterdeterminante der Form $\Phi_0 = (N!)^{-1/2} \det_{n_{\mathbf{k}}} [\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})]$ mit den Besetzungszahlen $n_{\mathbf{k}} = 0$ oder 1 , so dass $\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = N$ und mit den Einteilchenwellenfunktionen $\phi_{\mathbf{k}}$, die die Hartree-Fock Gleichungen erfüllen:

$$T_1 \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1) + \sum_{\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'} \int d\mathbf{r}_2 |\phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}_2)|^2 v(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1) - \sum_{\mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}'} \int d\mathbf{r}_2 \phi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}_2) v(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|) \phi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}_1) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_2) = \epsilon_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1). \quad (1)$$

Wir nehmen N Fermionen in einem Kasten des Volumens V mit periodischen Randbedingungen. Zur Einfachheit ignorieren wir den Spin in dieser Aufgabe.

- (a) Zeigen Sie, dass im Grenzfall sehr großer Volumen (insbesondere größer als typische Wechselwirkungslängen), die ebenen Wellen $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = V^{-1/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ die Eigenfunktionen zur Gleichung (1) sind und bestimmen Sie die Energie $\epsilon_{\mathbf{k}}$.
- (b) Zeigen Sie dass für ebene Wellen die Hartree-Fock Energie $E = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle$ geschrieben werden kann als $E = \langle T \rangle + \langle v \rangle_{\text{D}} - \langle v \rangle_{\text{E}}$ mit

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \\ \langle v \rangle_{\text{D}} &= \frac{N^2}{2V} \int d\mathbf{r} v(|\mathbf{r}|), \\ \langle v \rangle_{\text{E}} &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} n_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}'} \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} v(|\mathbf{r}|), \end{aligned} \quad (2)$$

wobei $|\Phi_0\rangle$ die Gesamtwellenfunktion ist.

- (c) Nehmen Sie eine Kontaktwechselwirkung der Form $v(r) = v_0 \delta(r)$ an und werten Sie die obigen Integrale aus. Welche Wahl der Besetzungszahlen $n_{\mathbf{k}}$ minimiert in diesem Fall die HF Energie und was ist dann der kleinste Wert der Hartree-Fockenergie?
- (d) Diskutieren Sie die Ergebnisse im Vergleich zum nicht wechselwirkenden Fall. Was kann bezüglich Wechselwirkungen mit einem endlichen räumlichen Wechselwirkungsbereich gesagt werden?