

Prof. Dr. Andreas Knorr

Dr. Alexander Carmele, Andreas Koher, Alexander Kraft

8. Übungsblatt – Quantenmechanik II**Abgabe: Di. 17.01.2017 um 8.15 Uhr, Beginn der Vorlesung!***Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.***Aufgabe 14 (7 Punkte): Coulomb-Integral**

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

$$J_{1s1s} = \int \int \frac{|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} d^3r_1 d^3r_2 = \frac{5}{4} \frac{1}{a_0}.$$

Verwenden Sie hierbei die Wellenfunktion Ψ :

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

wobei

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

die Grundzustands-Wellenfunktion eines Elektrons im Feld eines Kernes mit Ladung $Z = 2$ ist.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 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 Spektralbezeichnung der fünf möglichen Zustände des $2p^2$ Orbitals in energetisch aufsteigender Reihenfolge an. Erklären Sie Ihr Ergebnis.

Hinweis: Die Spektralbezeichnung $^{2S+1}L_J$ bezieht sich auf den Gesamtspin S , den Gesamtdrehimpuls L und die Quantenzahl der Spin-Bahn-Kopplung J .

8. Übung TPV WS2016/17

Aufgabe 16 (5 Punkte): Störungstheorie für Coulomb-Wechselwirkungen

In der Vorlesung vom 08.12.2016 wurde die Coulomb Wechselwirkung eines Zweielektronensystems untersucht. Der Wechselwirkungs-Hamiltonian ist gegeben durch:

$$H_c = \frac{1}{2} \sum_{1,2,3,4} V_{1,2,3,4} a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4$$

Hierbei wurden der Übersichtlichkeit wegen die Verbundindizes $m \equiv n_m, s_m$ mit $m \in [1, 2, 3, 4]$ eingeführt, wobei n die Hauptquantenzahl darstellt und s die Orientierung des Spins. Zeigen Sie nun, dass die Elemente der Wechselwirkungs-Matrix $W_{(m'n'),(mn)} = \langle m'n' | H_c | mn \rangle$ vereinfacht werden können zu:

$$W_{(m'n'),(mn)} = V_{n'm'mn} - V_{m'n'mn}$$

Bringen Sie dazu die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in Normalordnung und nutzen Sie die Symmetrie des Coulomb-Potentials aus.