Prof. Sabine Klapp
Dr. Alexander Carmele, Dr. Javier Cerrillo, Malte Selig

7. Übungsblatt – Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

Abgabe: Do. 13.12.2018 bis 12:00 Uhr, Briefkasten ER-Gebäude
Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 13 (6 Punkte): *Unterscheidbare und ununterscheidbare Teilchen*
Betrachten Sie die Wellenfunktion eines Zwei-Teilchenzustands $|\Psi_{ab}\rangle$ ohne Berücksichtigung des Spin-Freiheitsgrades.

(a) Berechnen Sie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für unterscheidbare und ununterscheidbare Teilchen in diesem Zustand. Diskutieren Sie das Ergebnis für $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}$.

(b) Wählen Sie für die Wellenfunktionen der Einteilchenzustände in a) ebene Wellen $\langle \mathbf{r}_1 | \Psi_a \rangle = \exp[-i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_1]/\sqrt{V}$. Wie sieht damit die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\langle \Psi_{ab} | \Psi_{ab} \rangle$ für klassische Teilchen, Bosonen und Fermionen aus?

Aufgabe 14 (14 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: $\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \Psi_{100} \rangle = \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, Z_{\text{eff}}) = \psi_{100}(\mathbf{r}_1, Z_{\text{eff}})\psi_{100}(\mathbf{r}_2, Z_{\text{eff}})$, 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 Ritzschen Variationsverfahren zu einem Extremum bei $Z_{\text{eff}} = Z - 5/16$ führt und daraus der Näherungswert

$$E_g = \min\left(\langle \Psi_{100} | H | \Psi_{100} \rangle\right) = \left(-2Z^2 + \frac{5}{4}Z - 2\left(\frac{5}{16}\right)^2\right)\mathrm{Ry}$$

für die Grundzustandsenergie des Helium-Atoms folgt (1 Ry $= \hbar^2/(m_e a_0^2) \approx 13.6$ eV). Zeigen Sie, dass die entsprechende Wellenfunktion normiert ist, und rechnen Sie dann den Energiemittelwert im Ortsraum aus. Leiten Sie diesen nach Z_{eff} ab und suchen das Minimum. Setzen Sie den gefundenen Wert in den Energiemittelwert ein.

(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 (a) und dem experimentellen Wert $E_g = -78.975$ eV.

(c) Wie lässt sich anschaulich erklären, dass der Wert von Z_{eff} gegenüber der Kernladung $Z = 2$ des Helium-Atoms reduziert ist?