

**Übungen zur Quantenmechanik II****Blatt 4****Aufgabe 10: 2-Teilchen-Operator**

2 Punkte

Gegeben sei der 2-Teilchen-Operator

$$A = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} A(i, j)$$

und eine Produktwellenfunktion von drei Teilchen

$$\Psi = \Psi_1(1)\Psi_2(2)\Psi_3(3).$$

Berechnen Sie explizit  $(\Psi, A\Psi)$  für symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen.**Aufgabe 11: Hartree-Fock für Beryllium-Atom**

1+4+2 = 7 Punkte

Beryllium hat die Kernladungszahl  $Z = 4$  und 4 Hüllenelektronen. Im Folgenden nehmen wir an, dass im Grundzustand die  $1s$  und  $2s$  Orbitale gefüllt sind. Das Atom wurde übrigens 1797 von Vauquelin entdeckt.

1. Was ist die Slater-Determinante für den Grundzustand des Atoms? Bezeichnen Sie z.B. den  $1s$  Zustand des 'ersten Elektrons' mit Spin nach oben mit  $\psi_{100}(\mathbf{x}_1)\chi_{1\uparrow}$ .
2. Finden Sie den Ausdruck für den (genäherten) Erwartungswert der Grundzustandsenergie, ausgedrückt durch die noch unbekanntenen Einteilchen-Wellenfunktionen  $\psi_{100}$  und  $\psi_{200}$ .
3. Nun kann man sofort die selbstkonsistenten Hartree-Fock Gleichungen für die Einteilchen-Wellenfunktionen angeben. Bei einer iterativen Lösung wählt man oft die Wasserstoff-Wellenfunktionen (mit  $Z=0$ ) als Startwerte. Bestimmen Sie die Grundzustandsenergie für die Slaterdeterminante gebildet mit den Wasserstoff-Wellenfunktionen. Wie nahe kommen Sie an den exakten Wert  $-14.57 e^2/a$ ?

Hinweise: Die gesuchte Slater-Determinante setzt sich aus den vier Einteilchen-Wellenfunktionen  $\psi_{n00}(\mathbf{x}_a)\chi_{a,s}$  zusammen. Hierin bezeichnet  $n \in \{1, 2\}$  die Hauptquantenzahl,  $s \in \{\uparrow, \downarrow\}$  die 3-Komponenten des Spins und  $a \in \{1, 2, 3, 4\}$  numeriert das Elektron. Kennzeichnen Sie in Ihrer Lösung bitte das 'dritte Elektron' mit Hauptquantenzahl 1 und Spin nach oben mit  $\psi_{100}(\mathbf{x}_3)\chi_{3,\uparrow}$ .

Für die letzte Teilaufgabe benötigen Sie folgende Integrale für die Berechnung der mittleren kinetischen Energie und Kern-Elektron Wechselwirkung für Wasserstoff-Wellenfunktionen,

$$\int d^3x |\nabla\psi_{100}(\mathbf{x})|^2 = \frac{Z^2}{a^2} \quad , \quad \int d^3x |\nabla\psi_{200}(\mathbf{x})|^2 = \frac{1}{4} \frac{Z^2}{a^2}$$

$$\int d^3x \frac{|\psi_{100}(\mathbf{x})|^2}{|\mathbf{x}|} = \frac{Z}{a} \quad , \quad \int d^3x \frac{|\psi_{200}(\mathbf{x})|^2}{|\mathbf{x}|} = \frac{1}{4} \frac{Z}{a} \quad ,$$

und folgende Integrale zur Berechnung des Hartree- und Austausch-Terms (Direkter und Austausch-Term):

$$\int d^3x \int d^3y \frac{\psi_{100}^*(\mathbf{x})\psi_{200}^*(\mathbf{y})\psi_{100}(\mathbf{x})\psi_{200}(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} = \frac{17}{81} \frac{Z}{a}$$

$$\int d^3x \int d^3y \frac{\psi_{100}^*(\mathbf{x})\psi_{100}^*(\mathbf{y})\psi_{200}(\mathbf{x})\psi_{200}(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} = \frac{16}{729} \frac{Z}{a}.$$

Denken Sie daran, dass  $\hbar^2/m = ae^2$  ist.

**Zur Information:** Die oben angegebenen Integrale können mit Hilfe einer Fouriertransformation berechnet werden. Es sei

$$\mathcal{F}(f)(\mathbf{k}) = \hat{f}(\mathbf{k}) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{x})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}d^3x$$

die Fouriertransformierte von  $f$ . Dann gilt

$$\int d^3x \int d^3y \frac{f^*(\mathbf{x})g(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} = \frac{1}{2\pi^2} \int d^3k \frac{\hat{f}^*(\mathbf{k})\hat{g}(\mathbf{k})}{|\mathbf{k}|^2}.$$

Wählt man zum Beispiel  $f = \psi_{001}^*\psi_{001}$  und  $g = \psi_{200}^*\psi_{200}$  dann kann man mit Hilfe von

$$\mathcal{F}(\psi_{100}^*\psi_{100})(\mathbf{k}) = \frac{16Z^4}{(2Z^2 + |\mathbf{k}|^2)^2}$$

und der Fourier-Transformierten von  $\psi_{200}^*\psi_{200}$  das Integral berechnen, das man für den Hartree-Term benötigt.

**Abgabetermin:** Dienstag, 03.05.2016, vor der Vorlesung