Übungen zur Quantenmechanik II

9. Übungsblatt *5. Jan. 2006*

1.) Die einfachste Näherung, um den Grundzustand des Heliumatoms zu berechnen, nimmt folgende Wellenfunktion

$$\phi_{He} \;=\; \tfrac{1}{\sqrt{2}}\big\{\chi_\uparrow(1)\,\chi_\downarrow(2) - \chi_\downarrow(1)\,\chi_\uparrow(2)\big\}\;\varphi_{1s}(\vec r_1)\,\varphi_{1s}(\vec r_2) \qquad (*)$$

als Ausgangspunkt. Diese Funktion zweier Elektronen mit den Koordinaten $\vec r_1$ und $\vec r_2$, deren Gesamtspin Null ist (Singulett) ist nur ein Produkt gleicher $1s$–Funktionen mit $a_0 = \hbar^2/(m\,e^2)$

$$\varphi_{1s}(\vec r) \propto \mathrm{e}^{-Z\,r/a_0}\;.$$

Für das Ion He^+ wäre diese Wellenfunktion mit $Z = 2$ exakt. Für das neutrale He mit zwei Elektronen kann $(*)$ nur eine Näherung sein mit einem kleineren Z. Läßt man den Spinanteil weg, so vereinfacht sich der Ansatz für die Wellenfunktion zu

$$\psi(\vec r_1, \vec r_2) = \tfrac{Z^3}{\pi\,a_0^3}\,\mathrm{e}^{-(Z/a_0)\,(r_1+r_2)}\;. \qquad (**)$$

Mit der HAMILTONfunktion für das Heliumatom

$$\mathcal{H} \;=\; -\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\left(\nabla_1^2 + \nabla_2^2\right)\;-\;e^2\left(\frac{2}{r_1}+\frac{2}{r_2}\right)\;+\;\frac{e^2}{r_{12}}$$

besteht nun die Aufgabe, die niedrigste Energie $\langle\mathcal{H}\rangle$

$$\langle\mathcal{H}\rangle \;=\; \iint d^3r_1\,d^3r_2\,\psi(\vec r_1,\vec r_2)\,\mathcal{H}\,\psi(\vec r_1,\vec r_2)$$

durch Variation des Z–Wertes zu finden. Dabei sind alle Integrale einfach zu berechnen, bis auf die Wechselwirkungsenergie der beiden Elektronen

$$\left\langle\frac{e^2}{r_{12}}\right\rangle \;=\; \iint d^3r_1\,d^3r_2\,|\psi(\vec r_1,\vec r_2)|^2\,\frac{e^2}{|\vec r_1 - \vec r_2|} \;=\; \frac{5}{8}\,\frac{Z\,e^2}{a_0}$$

Die Idee zur Lösung ist $1/|\vec r_1 - \vec r_2|$ nach Kugelfunktionen zu entwickeln, wobei man nach dem ersten Term abbrechen kann, denn die höheren Terme geben wegen ihrer Winkelabhängigkeiten keine Beiträge.

Zeige also, daß der optimale Wert von Z_0 gleich $27/16$ ist, und daß die Energie $\langle\mathcal{H}\rangle = Z_0^2\,e^2/a_0$ nur etwa zwei Prozent gegenüber dem experimentellen Wert zu groß ist.