



Aufgabe 30: Vielteilchen-Wellenfunktion im Kastenpotential (mündlich, 10 Punkte)

Betrachten Sie erneut das System aus Aufgabe 28, im Singulett-Zustand (Parazustand), nunmehr mit repulsiver Kontaktwechselwirkung

$$V = +\lambda \delta(x_1 - x_2), \quad \lambda > 0.$$

Für den Ansatz

$$|\Psi_0\rangle = |\psi_1\rangle^{(1)} |\psi_1\rangle^{(2)} |\chi_{\text{Sing}}\rangle$$

für den Grundzustand haben Sie in Aufgabe 28 bereits die Energie berechnet.

Erweitern Sie nun den Ansatz zu

$$|\Psi\rangle = |\Psi_{\text{Raum}}\rangle |\chi_{\text{Sing}}\rangle \quad \text{mit} \quad \Psi_{\text{Raum}}(x_1, x_2) = a \psi_1(x_1) \psi_1(x_2) + b \psi_2(x_1) \psi_2(x_2),$$

also um eine „angeregte Konfiguration“, in der beide Teilchen in einem höheren Einteilchenzustand vorliegen (*Bem.*: Die Anregung nur eines Teilchens erweist sich als uninteressant).

- [1P] Ist das vorgeschlagene $\Psi_{\text{Raum}}(x_1, x_2)$ zulässig? Welche Bedingung müssen a, b erfüllen, damit $|\Psi\rangle$ normiert ist? Ist $|\Psi\rangle$ eine Slater-Determinante?
- [6P] Bestimmen Sie den Erwartungswert $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ der Energie und optimieren Sie diesen bzgl. a und b , wobei $|\Psi\rangle$ normiert sein soll. Beschränken Sie sich der Einfachheit halber auf kleine Werte von λ und b .
- [1P] $\rho(x_1, x_2) = |\Psi_{\text{Raum}}(x_1, x_2)|^2$ ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte. Für $x_1 = x_2$ deutet sie an, mit welcher Wahrscheinlichkeit beide Teilchen am gleichen Ort zu finden sind. Skizzieren Sie $\rho(x_1, x_2 = x_1)$ für $\lambda = 0$ und für $\lambda > 0$.
- [2P] Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse aus b) mit den Ergebnissen der Störungstheorie (Energiekorrektur in 1. und 2. Ordnung). Nehmen Sie dazu den ursprünglichen Parazustand $|\Psi_0\rangle$ als Ausgangspunkt und betrachten Sie als Anregungszustand nur $|\psi_2\rangle^{(1)} |\psi_2\rangle^{(2)} |\chi_{\text{Sing}}\rangle$.

Aufgabe 31: Hartree-Fock-Näherung für Helium (schriftlich, 10 Punkte)

Betrachten Sie das Helium-Atom mit dem Hamiltonoperator

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} - \frac{Z e^2}{4\pi \epsilon_0 r_1} - \frac{Z e^2}{4\pi \epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

mit der Spin-Triplett-Wellenfunktion aus zwei Orbitalen φ_1, φ_2

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) - \varphi_2(\vec{r}_1) \varphi_1(\vec{r}_2)],$$

wobei $\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$ gilt.

- a) [4P] Bestimmen Sie den Energieerwartungswert $\langle \psi | H | \psi \rangle$ in Ortsdarstellung und identifizieren Sie Hartree- und Fock-Anteil.
- b) [3P] Berechnen Sie die Energiekorrektur durch den Hartree-Anteil. Verwenden Sie als Orbital-Wellenfunktionen:

$$\varphi_1(\vec{r}) = \psi_{200}^{\text{H}}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{32\pi a_B^3}} \left(2 - \frac{Z}{a_B} r\right) \exp\left(-\frac{Z}{2a_B} r\right)$$

$$\varphi_2(\vec{r}) = \psi_{100}^{\text{H}}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_B^3}} \exp\left(-\frac{Z}{a_B} r\right).$$

- c) [3P] Was ergibt sich analog zu b) für die Energiekorrektur durch den Fock-Anteil?