Aufgabe 20 (schriftlich): Hartree-Fock-Näherung für Helium (13 Punkte)
Betrachten Sie das Helium-Atom mit dem Hamiltonoperator

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

mit der Wellenfunktion

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

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

a) Bestimmen Sie den Energieerwartungswert $\langle \psi | \, H \, | \psi \rangle$ in Ortsdarstellung und identifizieren Sie Hartree- und Fock-Anteil.

b) Berechnen Sie die Energiekorrektur durch den Hartree-Anteil. Verwenden Sie als Wellenfunktionen:

$$\varphi_1(\vec{r}) = \psi^{\mathrm{H}}_{200}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{32\pi a_{\mathrm{B}}^3}}\left(2 - \frac{Z}{a_{\mathrm{B}}} r\right) \exp\left(-\frac{Z}{2a_{\mathrm{B}}} r\right)$$

$$\varphi_2(\vec{r}) = \psi^{\mathrm{H}}_{100}(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_{\mathrm{B}}^3}} \exp\left(-\frac{Z}{a_{\mathrm{B}}} r\right)$$

c) Was ergibt sich analog zu **b)** für die Energiekorrektur durch den Fock-Anteil?

Aufgabe 21 (mündlich): Born-Oppenheimer-Näherung (10 Punkte)
Der Hamiltonoperator für ein System aus zwei Massen M und m mit $M \gg m$ lautet

$$H = \frac{p_1^2}{2M} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2} k_1 x_1^2 + \frac{1}{2} k_2 (x_1 - x_2)^2 \ .$$

a) Betrachten Sie das Problem zunächst klassisch. Stellen Sie die klassischen Bewegungsgleichungen für x_1 und x_2 auf und bestimmen Sie die Eigenfrequenzen.
Hinweis: Sie können sich überlegen wie eine mögliche klassische Realisierung des Systems aussieht und davon ausgehend die Bewegungsgleichungen ableiten. Oder Sie fassen den Hamiltonoperator als klassische Hamiltonfunktion auf und stellen die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen auf.

b) Benutzen Sie die Born-Oppenheimer-Näherung um die quantenmechanischen Eigenenergien zu bestimmen.
Hinweis: Vernachlässigen Sie dazu zunächst die Bewegung der schweren Masse M und betrachten Sie die Bewegung der leichten Masse m. Danach betrachten Sie die schwere Masse M im zuvor berechneten effektiven Potential.

c) Vergleichen Sie die Ergebnisse aus **a)** und **b)**. Beachten Sie dabei, dass $M \gg m$ gilt.