



Aufgabe 23 *Hartree Näherung für das He Atom*

In der Hartree Näherung für Vielelektronenatome wird der Effekt der Coulomb Abstoßung zwischen den Elektronen über die Wechselwirkung eines jeden Elektrons mit dem elektrischen Potential beschrieben, das die quantenmechanisch berechnete mittlere Ladungsdichte der übrigen Elektronen am Ort des betrachteten Elektrons hervorruft. Das effektive elektrische Potential, dem sich jedes Elektron ausgesetzt sieht, ist deshalb

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(\vec{r}) &= -\frac{Ze}{|\vec{r}|} + \sum_{k=2}^N \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_N \frac{e|\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_k|} \\ &= -\frac{Ze}{|\vec{r}|} + V_H(\vec{r}) \equiv -\frac{Z_{\text{eff}}(\vec{r})e}{|\vec{r}|} . \end{aligned}$$

- Wieso wird nur von $k = 2$ bis $k = N$ summiert? Könnte man die Summe auch von $k = 1$ bis $k = N - 1$ nehmen? Warum?
- Berechnen Sie das Hartree Potential $V_H(\vec{r})$ für den Grundzustand des He Atoms. Approximieren Sie dabei $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ durch die Grundzustandswellenfunktion des wechselwirkungsfreien Systems.
- Bestimmen, skizzieren und interpretieren Sie die ortsabhängige effektive Kernladungszahl $Z_{\text{eff}}(\vec{r})$ für Helium.

Aufgabe 24 *Heitler-London-Näherung für das Wasserstoffmolekül*

Demonstrieren Sie mit Hilfe einer einfachen Modellrechnung (HEITLER–LONDON-Verfahren), dass die homöopolare (chemische) Bindung des H_2 -Moleküls eine unmittelbare Folge des Antisymmetrisierungsprinzips ist.

- Geben Sie dazu zunächst den Hamilton-Operator des Systems ohne Spinanteil an. Betrachten Sie dabei die Protonen als bei festem Abstand fixiert.
- Klassifizieren Sie die Energieeigenfunktionen nach dem Spinanteil in Singulett- und Triplett-Zustände.
- Wie lauten die Energieeigenfunktionen bei unendlichem Kernabstand?
- Betrachten Sie in (c) das Potential des HAMILTON-Operators aus (a) als Störpotential und berechnen Sie die Grundzustandsenergien störungstheoretisch bis zur 1. Ordnung.