



Aufgabe 22 *Ritz Verfahren für den Grundzustand eines He Atoms*

Berechnen Sie näherungsweise die Grundzustandsenergie E_0 des He Atoms mit Hilfe des Ritz'schen Variationsverfahrens. Benutzen Sie dabei den folgenden Ansatz für den Ortsanteil der Grundzustandswellenfunktion:

$$\Psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\beta}{a_B} \right)^3 \exp \left[-\beta (|\vec{r}_1| + |\vec{r}_2|) / a_B \right],$$

wobei β ein Variationsparameter ist und a_B der Bohr Radius. Interpretieren Sie das Ergebnis. Der experimentelle Wert von E_0 ist -79 eV . Wie groß ist der approximative Wert?

Hinweis: Um das Integral $\int d\Omega_1 d\Omega_2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ zu berechnen, orientieren Sie \vec{r}_1 entlang der z-Achse.

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

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(\vec{r}) &= -\frac{Ze}{|\vec{r}|} + \sum_{k=2}^N \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_N \frac{e|\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_2)|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_k|} \\ &= -\frac{Ze}{|\vec{r}|} + V_H(\vec{r}) \equiv -\frac{Z_{\text{eff}}(\vec{r})e}{|\vec{r}|}. \end{aligned}$$

- 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.