

2 Základní stav atomu helia variačně

Hamiltonián popisující elektrony obalu atomu helia je

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2M} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2M} - \frac{2\gamma}{\hat{r}_1} - \frac{2\gamma}{\hat{r}_2} + \frac{\gamma}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad \gamma = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0},$$

kde první dva členy jsou kinetická energie elektronů, druhé dva členy popisují interakci jednotlivých elektronů s atomovým jádrem a poslední člen udává elektrostatické odpuzování mezi oběma elektrony. Elektrony v obalu jsou nerozlišitelné fermiony se spinem $s = \frac{1}{2}$ a hmotností M . Jádro považujte za bodovou částici, spin-orbitální interakci a jaderné pohyby zanedbejte.

Uvažujte následující normalizovanou testovací vlnovou funkcií pro jeden elektron základního stavu helia:

$$\psi(\mathbf{r}; Z_{\text{eff}}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z_{\text{eff}}}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Z_{\text{eff}}}{a_0} r},$$

kde $a_0 = \hbar^2/(\gamma M)$ je Bohrovův poloměr a $Z_{\text{eff}} > 0$ je variační parametr představující efektivní náboj jádra, který elektron vnímá.¹

1. (1/2 bodu) Napište prostorovou část testovací vlnové funkce $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; Z_{\text{eff}})$ pro oba elektrony helia v základním stavu. Jak splníte antisymetrizační požadavek na celkovou vlnovou funkci fermionů?
2. (2 body) Vypočítejte analyticky střední hodnotu energie

$$E(Z_{\text{eff}}) = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; Z_{\text{eff}}) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; Z_{\text{eff}}) d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2.$$

Využijte znalosti integrálu přes úhlové proměnné:

$$I(r_1, r_2) = \int \frac{d\Omega_1 d\Omega_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = 4\pi \int_0^{2\pi} d\phi_2 \int_0^\pi \sin\theta d\theta \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta}} = \frac{(4\pi)^2}{\max(r_1, r_2)}$$

(souřadná soustava je při výpočtu tohoto dvojného integrálu orientována tak, že osa z_1 míří do směru vektoru $\mathbf{r}_2$).

3. (1 bod) Najděte optimální hodnotu variačního parametru Z_{eff}^* a odpovídající energii.
4. (1/2 bodu) Porovnejte získaný odhad energie základního stavu helia s experimentální hodnotou $E_{\text{exp}} = -79,0 \text{ eV}$ a určete relativní chybu pro zadanou testovací funkci.
5. (1/2 bodu) Jaký je fyzikální význam získané hodnoty variačního parametru? Jaká je jeho hodnota ve srovnání s nábojem jádra helia $Z = 2$ a proč?
6. (1/2 bodu) Navrhněte jinou testovací vlnovou funkci pro elektrony helia, která by mohla sloužit k odhadu energie základního stavu. Zdůvodněte svůj návrh.
7. (nepovinně) Vypočítejte střední hodnotu energie základního stavu helia pomocí vámi navržené testovací vlnové funkce a porovnejte získaný odhad s výsledkem z předchozích bodů.

Poznámka: Úlohu můžete řešit v atomových jednotkách ($\hbar = M = \gamma = 1$), ve kterých Bohrovův poloměr je $a_0 = 1$ a energie je měřena v jednotkách Hartree ($1 E_H = 2 \text{ Ry} = 2 \cdot 13,6 \text{ eV}$); v těchto jednotkách je $E_{\text{exp}} = -2,90 E_H$.

¹Pro $Z_{\text{eff}} = 1$ by tato funkce odpovídala vlnové funkci základního stavu elektronu v atomu vodíku.