Prof. Dr. Sabine Klapp
Dr. Judith Lehnert,
Dr. Marten Richter,
Dr. Torben Winzer

5. Übungsblatt – Quantenmechanik II

Abgabe: Do. 26. November 2015 bis 8:30 Uhr im Hörsaal

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden **Zwischenschritte** *und* **ausführliche Kommentare** *zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es Punkte! Die Abgabe soll in 3er-Gruppen erfolgen. Bitte geben Sie Ihre Namen, Matrikelnummern und die Übung an!*

Aufgabe 1 (10 Punkte): *Heitler–London-Theorie des Wasserstoffmoleküls (3+4+3=10 Punkte)*

Wir betrachten zwei wechselwirkende Elektronen, welche durch den Hamiltonian $\mathcal{H} = \mathcal{H}_a + \mathcal{H}_b + \mathcal{H}_W$ beschrieben werden. Hier sind die Ein-Teilchen-Hamiltonians durch $\mathcal{H}_\alpha$ $(\alpha = a, b)$ und der Zwei-Teilchen-Wechselwirkungs-Hamiltonian durch $\mathcal{H}_W$ gegeben. Für die normierten Ein-Elektronen-Ortswellenfunktionen $\phi_\alpha(\mathrm{r})$ gilt

$$\mathcal{H}_0\phi_\alpha(\mathbf{r}) = \epsilon_\alpha\phi_\alpha(\mathbf{r}), \quad \mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_a + \mathcal{H}_b.$$

Als Ansatz für den Zwei-Elektronen-Zustand betrachten wir die Variations-Wellenfunktion

$$\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = c_1\Psi_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) + c_2\Psi_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2), \quad \Psi_1(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \equiv \phi_a(\mathbf{r}_1)\phi_b(\mathbf{r}_2), \quad \Psi_2(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \equiv \phi_a(\mathbf{r}_2)\phi_b(\mathbf{r}_1)$$

aus der Heitler–London-Theorie.

(a) Drücken Sie die Variations-Energie $E \equiv \langle\Psi|\,\mathcal{H}\,|\Psi\rangle / \langle\Psi|\Psi\rangle$ mit Hilfe der Coulomb- ($V \equiv \langle\Psi_1|\,\mathcal{H}_W\,|\Psi_1\rangle = \langle\Psi_2|\,\mathcal{H}_W\,|\Psi_2\rangle$), Austausch- ($U \equiv \langle\Psi_1|\,\mathcal{H}_W\,|\Psi_2\rangle = \langle\Psi_2|\,\mathcal{H}_W\,|\Psi_1\rangle$), und Überlapp- ($l \equiv \langle\phi_a|\phi_b\rangle = \langle\phi_b|\phi_a\rangle$) Integrale aus. Hierfür können Sie annehmen, daß $\epsilon_a = \epsilon_b$ gilt.

(b) Leiten Sie aus der Bedingung, dass die Variationsenergie ein Minimum haben sollte, die zwei Lösungen $c_1 = c_2$, $\Psi_{\mathrm{symm}} \propto \Psi_1 + \Psi_2$ und $c_1 = -c_2$, $\Psi_{\mathrm{antisymm}} \propto \Psi_1 - \Psi_2$ liefert. Finden Sie die entsprechenden Energien E_{symm} und E_{antisymm}.

(c) Mit Berüchsichtigung des Elektron-Spins, lassen sich vier antisymmetrische Zustände aus diesen zwei Bahn-Wellenfunktionen konstruieren (1 Singulett und 3 Tripletts):

$$\begin{aligned}
|\Psi_s\rangle &= |\Psi_{\mathrm{symm}}\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right] \\
|\Psi_{t,1}\rangle &= |\Psi_{\mathrm{antisymm}}\rangle \otimes |\uparrow\uparrow\rangle \\
|\Psi_{t,0}\rangle &= |\Psi_{\mathrm{antisymm}}\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right] \\
|\Psi_{t,-1}\rangle &= |\Psi_{\mathrm{antisymm}}\rangle \otimes |\downarrow\downarrow\rangle
\end{aligned}$$

Drücken Sie diese vier Zustände als Linearkombinationen von Slater-Determinanten aus.

Aufgabe 2 (11 Punkte): *Spin eines Zweiteilchensystems*
Betrachten Sie den Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ des Zwei-Spin-Systems. $|i\rangle_k \in \mathcal{H}_k, k \in \{1,2\}$ ist dabei die Basis der Spin-Einteilchen-Wellenfunktion des k-ten Einteilchen-Hilbertraums und $i \in \{1/2 \equiv\uparrow, -1/2 \equiv\downarrow\}$. D.h. für $|i\rangle_k$ gelten die bekannten Eigenwertgleichungen $\hat{S}^z_k |i\rangle_k = \hbar m_{k,i} |i\rangle_k, m_{k,i} \in \{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}$ und $\hat{\mathbf{S}}^2_k |i\rangle_k = \frac{3}{4}\hbar^2 |i\rangle_k$. Wir entwickeln den Zwei-Teilchen-Zustand $|\phi\rangle$ nach den Einteilchenfunktionen $|\phi\rangle = \sum_{i,j} a_{i,j} |i\rangle_1 |j\rangle_2$, $i,j \in \{\uparrow,\downarrow\}$. Und wir definieren einen neuen Operator $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$. Zur Erinnerung, die Spinleiteroperatoren der Einzelsysteme ist definiert durch $\hat{S}^\pm_k = \hat{S}^x_k \pm i\hat{S}^y_k$. und hat folgende Wirkung auf die Einteilchenbasis $|i\rangle_k$: $\hat{S}^\pm_k |i\rangle_k = f^\pm_{k,i} |i \pm 1\rangle_k$ mit $f^\pm_{k,i} = \hbar\sqrt{\frac{3}{4} - m_{k,i}(m_{k,i} \pm 1)}$. (Beweis im Tutorium).

1. Berechnen Sie die Wirkung des neuen Operators $\hat{\mathbf{S}}^z$ auf den Zustand $|i\rangle_1 |j\rangle_2$.
2. Stellen Sie $\hat{\mathbf{S}}^2$ nur mit der Hilfe der Operatoren $\hat{\mathbf{S}}^2_k$, $\hat{\mathbf{S}}^z_k$ und $\hat{\mathbf{S}}^{+/-}_k$ der Einzelsysteme dar.
3. Berechnen Sie Wirkung des neuen Operators $\hat{\mathbf{S}}^2$ auf den Zustand $|i\rangle_1 |j\rangle_2$ und reproduzieren Sie:

   $$\hat{\mathbf{S}}^2 |i\rangle_1 |j\rangle_2 = \hbar^2(\frac{3}{2}+2m_{1,i}m_{2,j}) |i\rangle_1 |j\rangle_2 + f^+_{1,i} \cdot f^-_{2,j} |i+1\rangle_1 |j-1\rangle_2 + f^-_{1,i} \cdot f^+_{2,j} |i-1\rangle_1 |j+1\rangle_2 .$$

   Hinweis: Benutzen Sie die Darstellung aus der vorherigen Teilaufgabe.
   Sind die Zustände $|i\rangle_1 |j\rangle_2$ Eigenzustände von $\hat{\mathbf{S}}^2$?
4. Kann der Zustand $|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2$ ununterscheidbaren Teilchen beschreiben?
5. Wir suchen jetzt eine Zweiteilchenbasis $|S, M_S\rangle$, die Eigenzustände der neuen Operatoren $\hat{\mathbf{S}}^z$ und $\hat{\mathbf{S}}^2$ sind. Dabei sind S, M_S zwei neue Quantenzahlen, anstatt der zwei alten Quantenzahlen $m_{1,i}, m_{2,i} \in \{\pm\frac{1}{2}\}$ der Einzelsysteme. Geben Sie kurz den Zusammenhang zwischen den neuen und alten Quantenzahlen an.
6. Wir betrachten die folgenden vier Zweiteilchenzustände: i) $|\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2$, ii)$|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2$, iii) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2)$, iv) $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 - |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2)$. Zeigen Sie nun unter Benutzung der vorhergehenden Ergebnisse, dass die Zustände i)-iv) Eigenzustände von $\hat{\mathbf{S}}^z$ und $\hat{\mathbf{S}}^2$ sind. Identifizieren Sie zugehörigen Elemente der Basiselemente $|S, M_S\rangle$ zu (i-iv). Welche nennt man davon Triplett- welche Singulettzustände und warum? Welche Zustände davon sind symmetrisch, welche antisymmetrisch?
7. Erklären Sie kurz, was man unter guten Quantenzahlen versteht.