Prof. Martin Schütz
Uni Regensburg
WS 2014/15

Jedenfalls bin ich überzeugt, dass der (Gott) nicht würfelt
Albert Einstein

Aufgabe 1: Spinoperator $S^2(1,2)$

Aus der Vorlesung sind folgende Relationen bekannt:

$$S^2(1,2) = S_x(1,2)^2 + S_y(1,2)^2 + S_z(1,2)^2 \tag{1}$$

$$S_j(1,2) = S_j(1) + S_j(2) \quad \text{mit} \;\; j = x, y, z \tag{2}$$

$$S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-) \qquad S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-) \tag{3}$$

a) Zeigen Sie, dass gilt:

$$S^2(1,2) = S^2(1) + S^2(2) + 2S_z(1)S_z(2) + S_+(1)S_-(2) + S_-(1)S_+(2) \tag{4}$$

b) Wenden Sie nun diesen Operator auf folgende Spinfunktionen an, und überprüfen Sie, ob diese Eigenfunktionen sind:

$$\Theta_1 = \alpha(1)\alpha(2) \tag{5}$$

$$\Theta_2 = \alpha(1)\beta(2) \tag{6}$$

$$\Theta_3 = \beta(1)\alpha(2) \tag{7}$$

$$\Theta_4 = \beta(1)\beta(2) \tag{8}$$

c) Betrachten Sie die folgenden zwei Linearkombinationen aus Θ_2 und Θ_3:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\Theta_2 + \Theta_3) \tag{9}$$

und

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\Theta_2 - \Theta_3) \tag{10}$$

Zeigen Sie, dass diese Linearkombinationen jeweils Eigenfunktionen zum $S^2(1,2)$-Operator sind.

Aufgabe 2: Slaterdeterminanten

Im folgenden sollen die Slater-Condon-Regeln nicht verwendet werden.

Gegeben sind zwei Slater-Determinanten:

$$|A\rangle = |\chi_I \chi_J\rangle \quad \text{und} \quad |B\rangle = |\chi_K \chi_L\rangle \tag{11}$$

mit orthonormalen Spinorbitalen $\chi_M(\mathbf{x})$.

a) Rechnen Sie explizit

$$\langle A|B\rangle \tag{12}$$

aus und erklären Sie das Ergebnis! Verwenden Sie, um Schreibarbeit zu sparen, für die Integrale:

$$\langle P|Q\rangle = \int \chi_P^*(\mathbf{x}_1)\chi_Q(\mathbf{x}_1)\mathrm{d}\mathbf{x}_1 \tag{13}$$

b) Betrachten Sie den 1-Teilchenteil des Hamilton-Operators:

$$\hat{H}^{core} = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}(i) \tag{14}$$

Gehen Sie von einem Zwei-Elektronensystems (N=2) aus, und rechnen Sie

$$\langle A|\hat{H}^{core}|B\rangle \tag{15}$$

aus. Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit den Slater-Condon Regeln, die Sie in der Vorlesung kennengelernt haben.