Theoretische Chemie
Prof. Dr. Wolfgang Eisfeld

Blatt 12

Übungen zur Vorlesung
Theoretische Chemie II

1. Die Spineigenfunktionen $|\chi_i\rangle = |\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ bilden ein vollständiges Orthonormalsystem und stellen damit eine Basis für den Hilbertraum $\mathcal{H}_s$ des Spins dar. Für Spin $s = \frac{1}{2}$ ist dieser Raum 2-dimensional, weshalb sich die in $\mathcal{H}_s$ wirkenden Operatoren als 2×2-Matrizen schreiben lassen.

   (a) Bestimmen Sie die Matrixdarstellungen von $\hat{s}^2$ und $\hat{s}_z$, indem Sie die Matrixelemente $\sigma_{ij} = \langle \chi_i | \hat{\sigma} | \chi_j \rangle$ berechnen.

   (b) Die Leiteroperatoren $\hat{s}_+$ und $\hat{s}_-$ sind definiert durch

   $$\hat{s}_+ = \hat{s}_x + \mathrm{i}\hat{s}_y \qquad \hat{s}_- = \hat{s}_x - \mathrm{i}\hat{s}_y$$

   und erfüllen die Gleichung

   $$\hat{s}_\pm \, |s, m_s\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} \, |s, m_s \pm 1\rangle \,.$$

   Berechnen Sie die Matrixdarstellungen von $\hat{s}_+$ und $\hat{s}_-$. Benutzen Sie diese Matrizen anschließend zur Bestimmung der Matrixdarstellungen von $\hat{s}_x$ und $\hat{s}_y$. (Die Matrizen s_x, s_y und s_z entsprechen bis auf einen konstanten Faktor den Pauli'schen Spinmatrizen.)

   (c) Zeigen Sie, dass $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ Eigenzustände von $\hat{s}_x^2$ aber keine Eigenzustände von $\hat{s}_x$ sind.

2. Betrachten Sie (wie in der Vorlesung) die niedrigen angeregten He Zustände. Zeigen Sie, dass die Zustände $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\bar{1}2\rangle \pm |1\bar{2}\rangle)$ Eigenfunktionen des Operators $\widehat{S}^2$ sind. Nutzen Sie dabei eine geeignete Darstellung von $\widehat{S}^2$ mittels Leiteroperatoren.

3. Gegeben ist die Slater-Determinante $\Psi_a^{SD} = |\chi_1\chi_2\chi_3\rangle$ mit den drei Spinfunktionen

   $$\chi_1 = \psi_1 \, |\alpha\rangle \qquad \chi_2 = \psi_1 \, |\beta\rangle \qquad \chi_3 = \psi_2 \, |\alpha\rangle$$

   Stellen Sie fest, ob Ψ_a^{SD} Eigenfunktion zu $\hat{S}_z$ und $\hat{S}^2$ ist.