Übungsblatt 8: (15 P.) **Abgabe: 11.12.12 bzw. 13.12.12**

Aufgabe 1: [5 P.] (schriftlich)

Zwei nichtwechselwirkende identische Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen befinden sich in einem unendlich tiefen eindimendsionalen Kastenpotential

$$V(x) = \begin{cases} 0\,, & \text{für} \quad |x| \le a\,, \\ +\infty\,, & \text{für} \quad |x| > a\,. \end{cases}$$

Da der Hamiltonoperator des betrachteten Zweiteilchensystems nicht vom Spin abhängt, vertauscht er mit den Operatoren $\mathbf{S}^2$ und S_z, und die Energieeigenzustände können unter anderem durch die Quantenzahlen S, M_s zum Gesamtspin gekennzeichnet werden ($\mathbf{S} = \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}$ Operator zum Gesamtspin).

Schreiben Sie die ensprechenden auf eins normierten Eigenfunktionen der sechs Zweiteilchenzustände niedriger Energien an. Wie groß sind die zugehörigen Energien des Zweiteilchensystems?

Hinweis:

1. Die Einteilchenenergien
$$\epsilon_{n-1} = \frac{\hbar^2\,\pi^2}{8\,m\,a^2}\,n^2\,, \qquad n \in N$$
und Einteilchen-Energireigenfunktionen
$$\psi_{n-1}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}}\,\cos\frac{n\,\pi\,x}{2\,a}\,, & |x| \le a\,, \quad n = 1,\,3,\,5\ldots \\ \frac{1}{\sqrt{a}}\,\sin\frac{n\,\pi\,x}{2\,a}\,, & |x| \le a\,, \quad n = 2,\,4,\,6\ldots \end{cases}$$
können dabei als bekannt angesehen werden.
2. Es ist vorteilhaft, die Ergebnisse für zwei Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen (siehe Kapitel 2 der Vorlesung), sowie für das Helium Atom (Kapitel 5 der Vorlesung), zu verwenden.

Aufgabe 2: (mündlich)

Die Gesamtwellenfunktion ψ des Systems aus N Fermionen lässt sich durch die Slater-Determinante

$$\psi := \psi(1,2,\ldots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1) & \varphi_1(2) & \ldots & \varphi_1(N) \\ \varphi_2(1) & \varphi_2(2) & \ldots & \varphi_2(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(1) & \varphi_N(2) & \ldots & \varphi_n(N) \end{vmatrix}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\vec{\sigma}} (-1)^{P(\vec{\sigma})} \varphi_{\sigma_1}(1)\varphi_{\sigma_2}(2)\ldots\varphi_{\sigma_N}(N)$$

beschreiben, wobei $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N)$ dem Vektor der Zustände σ_l am Ort l entspricht. Dabei gilt stets

$$\sigma_i \in \{1, 2, \ldots, N\} \qquad \forall i = 1, 2, \ldots, N$$
$$\sigma_i \ne \sigma_j \qquad \forall i \ne j$$
$$\sum_{\vec{\sigma}} = \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\ldots,\sigma_N} = \sum_{\sigma_1}\sum_{\sigma_2}\cdots\sum_{\sigma_N}.$$

$P(\vec{\sigma})$ bezeichnet die Anzahl an Permutationen, die nötig sind $\vec{\sigma}$ in die Form $(1, 2, \ldots, N)$ zu bringen. Der Hamiltonoperator sei gegeben durch

$$H = \sum_{l=1}^{N} H(l) \tag{1}$$

mit

$$H(l)|\varphi_n(l)>= E_n|\varphi_n(l)> \qquad \text{und} \qquad <\varphi_n(l)|\varphi_m(l)>= \delta_{n,m}.$$

a) **[2P.]** Vereinfachen Sie zunächst folgenden Ausdruck:

$$<\varphi_{\sigma'_1}(1)\varphi_{\sigma'_2}(2)\ldots\varphi_{\sigma'_N}(N)|H(l)|\varphi_{\sigma_1}(1)\varphi_{\sigma_2}(2)\ldots\varphi_{\sigma_N}(N)> .$$

b) **[2P.]** Begründen Sie, dass folgende Relation gilt

$$<\varphi_{\sigma_l}(l)|H(l)|\varphi_{\sigma_l}(l)>=<\varphi_{\sigma_l}(j)|H(j)|\varphi_{\sigma_l}(j)> \ \forall j = 1, \ldots, N.$$

Was gilt dann für den Ausdruck

$$\sum_l <\varphi_{\sigma_l}(l)|H(l)|\varphi_{\sigma_l}(l)> \qquad ?$$

c) **[2P.]** Berechnen Sie nun den Erwartungswert $<\psi|H|\psi>$ vom Hamiltonoperator (1).

Aufgabe 3: (mündlich)

Betrachten Sie den 2-Fermionen-Hamiltonoperator

$$H = H(1) + H(2) + V(1, 2). \tag{2}$$

Das Wechselwirkungspotential $V(1, 2)$ beider Fermionen sei symmetrisch gegenüber Vertauschung $V(1, 2) = V(2, 1)$.

a) **[2P.]** Formulieren Sie die Gesamtwellenfunktion $\psi(1, 2)$ in Hartree-Fock-Näherung. Verwenden Sie dabei orthonormierte Eigenzustände zu den Einteilchen-Hamiltonoperatoren.

b) **[2P.]** Berechnen Sie den Erwartungswert des Gesamthamiltonoperators (2).