

- 4.1 *Ortho- und Para-Helium.* Das Pauliprinzip verlangt, dass die Gesamtwellenfunktion zweier Elektronen unter Vertauschen beider Teilchen antisymmetrisch ist.

Spin: Die Basis der Spinzustände zweier Spin-1/2 Teilchen ist wieder gegeben durch  $|\alpha\rangle^{(1)} \otimes |\beta\rangle^{(2)}$  mit  $\alpha, \beta \in \{\uparrow, \downarrow\}$ . Für die einzelnen Teilchen gilt  $(\mathbf{s}^{(i)})^2 |\alpha\rangle^{(i)} = \frac{3\hbar^2}{4} |\alpha\rangle^{(i)}$  und  $s_z^{(i)} |\alpha\rangle^{(i)} = \hbar m(\alpha) |\alpha\rangle^{(i)}$  mit  $i = 1, 2$  und  $m(\uparrow) = \frac{1}{2}$ ,  $m(\downarrow) = -\frac{1}{2}$ . Der Gesamtspin lautet  $\mathbf{S} = \mathbf{s}^{(1)} + \mathbf{s}^{(2)} \equiv \mathbf{s}^{(1)} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{s}^{(2)}$ .

- (i) Begründen Sie, warum der (normierte) Zustand

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle^{(1)} \otimes |\downarrow\rangle^{(2)} - |\downarrow\rangle^{(1)} \otimes |\uparrow\rangle^{(2)} \right)$$

antisymmetrisch unter Vertauschung der beiden Teilchen ist. Zeigen Sie die Identitäten  $\mathbf{S}^2 \chi_{00} = S_z \chi_{00} = 0$ . Daher wird  $\chi_{00}$  Spin-Singlett genannt.

- (ii) Begründen Sie, warum die (normierten) Zustände

$$\chi_{11} = |\uparrow\rangle^{(1)} \otimes |\uparrow\rangle^{(2)}, \chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\uparrow\rangle^{(1)} \otimes |\downarrow\rangle^{(2)} + |\downarrow\rangle^{(1)} \otimes |\uparrow\rangle^{(2)} \right), \chi_{1-1} = |\downarrow\rangle^{(1)} \otimes |\downarrow\rangle^{(2)}$$

symmetrisch unter Vertauschung beider Teilchen sind. Zeigen Sie die Identitäten  $\mathbf{S}^2 \chi_{1m_s} = 2\hbar \chi_{1m_s}$  und  $S_z \chi_{1m_s} = m_s \hbar \chi_{1m_s}$ . Die  $\chi_{1m_s}$  bilden also ein Spin-Triplett.

Ort: Den Hamilton-Operator  $H = \frac{1}{2m} \left( (\mathbf{p}^{(1)})^2 + (\mathbf{p}^{(2)})^2 \right) - Ze^2 \left( \frac{1}{r^{(1)}} + \frac{1}{r^{(2)}} \right) + e^2 \frac{1}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}|}$  kennen Sie schon. Vernachlässigt man die Wechselwirkung der Elektronen, faktorisieren die Ortsraum-Wellenfunktionen wie gehabt,

$$\Phi_{n_1, \ell_1, m_1, n_2, \ell_2, m_2}(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) = \phi_{n_1, \ell_1, m_1}(\mathbf{r}^{(1)}) \phi_{n_2, \ell_2, m_2}(\mathbf{r}^{(2)}).$$

- (iii) Begründen Sie, dass die Ortsraum-Wellenfunktion  $\Phi_0$  des Grundzustandes das Produkt der 1s-Wellenfunktionen ist. Welche Energie gehört dazu? Warum ist  $\Phi_0$  symmetrisch unter Vertauschung der beiden Elektronen? Der Gesamtbahndrehimpuls ist  $\mathbf{L} = \mathbf{L}^{(1)} + \mathbf{L}^{(2)}$ . Zeigen Sie  $(\mathbf{L})^2 \Phi_0 = L_z \Phi_0 = 0$ .

- (iv) Begründen Sie, dass die Ortsraum-Wellenfunktionen des ersten angeregten Zustandes Produkte von 1s- und 2ℓ-Wellenfunktionen sind,  $\ell \in \{s, p\}$ . Welche Energie gehört dazu? Zeigen Sie mit dem Ansatz

$$\Phi_{\ell m}^{\pm}(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \phi_{100}(\mathbf{r}^{(1)}) \phi_{2\ell m}(\mathbf{r}^{(2)}) \pm \phi_{2\ell m}(\mathbf{r}^{(1)}) \phi_{100}(\mathbf{r}^{(2)}) \right)$$

dass  $(\mathbf{L})^2 \Phi_{\ell m}^{\pm} = \hbar^2 \ell(\ell+1) \Phi_{\ell m}^{\pm}$ ,  $L_z \Phi_{\ell m}^{\pm} = \hbar m \Phi_{\ell m}^{\pm}$  ist, und dass unter Vertauschung  $\Phi_{\ell m}^{\pm}(\mathbf{r}^{(2)}, \mathbf{r}^{(1)}) = \pm \Phi_{\ell m}^{\pm}(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)})$  gilt.

Gesamt: Die vollständige Wellenfunktion hat die Form  $\Psi(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) = \Phi(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \chi_{sm_s}$ .

- (v) Folgern Sie aus dem Pauliprinzip, dass für den Grundzustand nur  $\Psi_0 = \Phi_0 \chi_{00}$  und für den ersten angeregten Zustand nur  $\Psi_{\text{para}} = \Phi_{\ell m}^+ \chi_{00}$  und  $\Psi_{\text{ortho}} = \Phi_{\ell m}^- \chi_{1m_s}$  möglich sind. Diskutieren Sie die möglichen Zustände im Para- ( $S = 1$ ) bzw. Ortho-Helium ( $S = 0$ ).

- 4.1 *Mehrteilchensysteme.*  $N$  untereinander nicht wechselwirkende Teilchen bewegen sich in einem äußeren Potential  $V(\mathbf{r})$ .

- (i) Zeigen Sie, dass sich die  $N$ -Teilchen Schrödingergleichung

$$\sum_{i=1}^N \left( \frac{(\mathbf{p}^{(i)})^2}{2m^{(i)}} + V(\mathbf{r}^{(i)}) \right) \psi(\mathbf{r}^{(1)}, \dots, \mathbf{r}^{(N)}) = E \psi(\mathbf{r}^{(1)}, \dots, \mathbf{r}^{(N)})$$

auf  $N$  1-Teilchen Schrödingergleichungen zurückführen läßt. 1 P.

- (ii) Die  $N$  Teilchen seien identisch. Wie lautet die normierte Gesamtwellenfunktion für Bosonen und wie für Fermionen? 2 P.

- (iii) Was läßt sich über die Grundzustandsenergien aussagen? 2 P.

- 4.2 *Mehr Mehrteilchensysteme.* Betrachten Sie ein System aus  $N$  Spin-1/2 Teilchen, z.B. Elektronen in einem Festkörper.

- (i) Welche Werte kann der Gesamtspin  $\mathbf{S}_{\text{total}} = \sum_{i=1}^N \mathbf{s}^{(i)}$  annehmen? 1 P.

- (ii) Wieviele verschiedene Multipletts existieren zu einem gegebenen festen  $\mathbf{S}_{\text{total}}$ ? 2 P.

- 4.3 *Noch mehr Mehrteilchensysteme.*  $N$  identische untereinander nicht wechselwirkende Spin-1/2 Teilchen der Masse  $m$  bewegen sich frei in einem drei-dimensionalen Kasten mit Seitenlänge  $L \gg 1$ . Die stationären Ortsraum-Wellenfunktionen sind

$$\phi_{n_x, n_y, n_z}(\mathbf{r}) = \left( \frac{2}{L} \right)^{3/2} \sin \left( n_x \frac{\pi x}{L} \right) \sin \left( n_y \frac{\pi y}{L} \right) \sin \left( n_z \frac{\pi z}{L} \right)$$

mit Energien  $E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{n_x, n_y, n_z}^2}{2m}$ , wobei hier der Wellenzahl-Vektor  $\mathbf{k}_{n_x, n_y, n_z} = (n_x \pi / L, n_y \pi / L, n_z \pi / L)^t$  eingeführt wurde.

- (i) Berechnen Sie die Anzahl  $n(E)$  von Einzelzuständen, deren Energie kleiner als  $E$  sind. Beachten Sie, dass zu jeder Ortsraum-Wellenfunktion zwei Zustände gehören, da die Teilchen Spin-1/2 haben. (Hinweis: Da  $L$  hinreichend groß sei, können Sie das Abzählen der durch die Vektoren  $\mathbf{k}$  gegebenen Gitterpunkte durch eine Integration ersetzen. Machen Sie sich dazu klar, daß es pro Volumenelement  $(\pi/L)^3$  des  $\mathbf{k}$ -Raumes einen Vektor  $\mathbf{k}_{n_x, n_y, n_z}$  gibt. Zur Kontrolle:  $n(E) = \frac{L^3}{3\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} E \right)^{3/2}$ .) 2 P.
- (ii) Nutzen Sie Ihr Ergebnis, um die maximale Energie des Grundzustandes, die sogenannte *Fermi-Energie*  $E_F$  des freien Elektronengases zu berechnen. 1 P.
- (iii) Berechnen Sie nun noch die Zustandsdichte  $\rho(E)$ , also die Anzahl der Zustände, deren Energie zwischen  $E$  und  $E + dE$  liegt. Drücken Sie  $\rho(E)$  alleine durch  $N$ ,  $E$  und  $E_F$  aus. 1 P.

12 P.