

**P::1** *Kopplung von Drehimpulsen:* Ein Elektron befinde sich in einem Zustand mit Bahndrehimpuls  $\ell = 1$ . Berechnen Sie die *Clebsch-Gordon-Koeffizienten*  $\langle \ell, m_\ell, s, m_s | j, m \rangle$  für die Kopplung des Bahndrehimpulses an den Spin des Elektrons. Hinweis: Verwenden Sie die Auf- und Absteige-Operatoren  $J_+ = L_+ + S_+$  und  $J_- = L_- + S_-$ . Machen Sie sich klar, daß damit – sofern  $L$  und  $S$  miteinander kommutieren – offensichtlich gilt:

$$\sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle = \sqrt{\ell(\ell+1) - m_\ell(m_\ell \pm 1)} |\ell, m_\ell \pm 1, s, m_s\rangle + \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)} |\ell, m_\ell, s, m_s \pm 1\rangle.$$

Weiterer Hinweis: Für den Zustand  $|\ell, m_\ell, s, m_s\rangle$  werden oft auch die Notationen  $|\ell, m_\ell\rangle |s, m_s\rangle$  und  $|\ell, m_\ell\rangle \otimes |s, m_s\rangle$  verwendet.

**P::2** Es seien  $a^+$  und  $a$  ein Paar von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, die den bekannten Beziehungen  $[a, a^+] = 1$ ,  $[a, a] = [a^+, a^+] = 0$  genügen. Zeigen Sie, daß damit die Operatoren

$$\begin{aligned} L_z &= \hbar(\ell - a^+a), \\ L_+ &= \hbar\sqrt{2\ell - a^+a}a, \\ L_- &= \hbar a^+\sqrt{2\ell - a^+a} \end{aligned}$$

die Drehimpulsalgebra erfüllen. Prüfen Sie außerdem nach, daß die Beziehung

$$(\vec{L})^2 = \hbar^2\ell(\ell + 1)$$

erfüllt ist. Wann ist diese Darstellung der Drehimpulsalgebra gültig?

Anmerkung: Diese Darstellung der Drehimpulsoperatoren geht auf T. Holstein und H. Primakoff zurück, zu finden in Phys. Rev. **58** (1940) 1098. Sie eignet sich besonders zur Untersuchung des semiklassischen Grenzfalles  $(\vec{L})^2 \gg \hbar^2$ .

**H::1** *Ortho- und Para-Helium:* Das Pauliprinzip verlangt, daß die Gesamtwellenfunktion, das Produkt von Orts- und Spin-Wellenfunktion, zweier Elektronen unter Vertauschen beider Teilchen antisymmetrisch ist. Betrachten Sie die beiden Anteile zunächst getrennt:

**Spin:** Die Basis der Spinzustände zweier Spin-1/2 Teilchen ist 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  $\mathbf{S} = \mathbf{s}^{(1)} + \mathbf{s}^{(2)} \equiv \mathbf{s}^{(1)} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{s}^{(2)}$ .

[1] Begründen Sie, warum der (normierte) Zustand

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

antisymmetrisch unter Vertauschung der beiden Teilchen ist.

[2] Zeigen Sie die Identitäten  $\mathbf{S}^2 \chi_{00} = S_z \chi_{00} = 0$ . Daher wird  $\chi_{00}$  Spin-Singlett genannt.

[3] Begründen Sie, warum die (normierten) Zustände

$$\begin{aligned} \chi_{11} &= |\uparrow\rangle^{(1)} \otimes |\uparrow\rangle^{(2)}, \\ \chi_{10} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle^{(1)} \otimes |\downarrow\rangle^{(2)} + |\downarrow\rangle^{(1)} \otimes |\uparrow\rangle^{(2)}), \\ \chi_{1-1} &= |\downarrow\rangle^{(1)} \otimes |\downarrow\rangle^{(2)} \end{aligned}$$

symmetrisch unter Vertauschung beider Teilchen sind.

[4] 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:** Vernachlässigt man im Hamiltonoperator zweier Elektronen im Coulombfeld  $Ze/r$ , gegeben durch

$$H = H_0 + H' = \underbrace{\frac{1}{2m} \left( (\mathbf{p}^{(1)})^2 + (\mathbf{p}^{(2)})^2 \right)}_{H_0} - Ze^2 \left( \frac{1}{r^{(1)}} + \frac{1}{r^{(2)}} \right) + \underbrace{e^2 \frac{1}{|\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}|}}_{H'}$$

die gegenseitige Abstoßung der beiden Elektronen  $H'$ , so hat man für jedes Elektron ein Wasserstoffproblem mit Kernladung  $Z$ . In der physikalisch recht gut erfüllten Näherung eines sehr schweren Kernes haben daher die Ortsraum-Wellenfunktionen  $\Phi$  von  $H_0$  die Produktform

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

[5] Begründen Sie, daß die Ortsraum-Wellenfunktion  $\Phi_0$  des Grundzustandes das Produkt der  $1s$ -Wellenfunktionen ist. Welche Energie gehört dazu?

[6] Warum ist  $\Phi_0$  symmetrisch unter Vertauschung der beiden Elektronen?

[7] Der Gesamtbahndrehimpuls ist  $\mathbf{L} = \mathbf{L}^{(1)} + \mathbf{L}^{(2)}$ . Zeigen Sie  $(\mathbf{L})^2 \Phi_0 = L_z \Phi_0 = 0$ .

[8] Begründen Sie, daß die Ortsraum-Wellenfunktionen des ersten angeregten Zustandes Produkte von  $1s$ - und  $2\ell$ -Wellenfunktionen sind,  $\ell \in \{s, p\}$ . Welche Energie gehört dazu?

[9] Betrachten Sie für den ersten angeregten Zustand den Ansatz

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

für die Ortsraum-Wellenfunktion. Zeigen Sie, 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. Zeigen Sie weiter, daß unter Vertauschung der Teilchen gilt:

$$\Pi\Phi_{\ell m}^{\pm}(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) \equiv \Phi_{\ell m}^{\pm}(\mathbf{r}^{(2)}, \mathbf{r}^{(1)}) = \pm\Phi_{\ell m}^{\pm}(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}).$$

**Gesamt:** Die vollständigen Wellenfunktionen  $\Psi$  sind ein Produkt von Ortswellenfunktion  $\Phi$  und Spinor  $\chi$ , also von der Form  $\Psi(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}) = \Phi(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)})\chi_{sm_s}$ .

[10] Folgern Sie aus dem Pauliprinzip, daß für den Grundzustand nur  $\Psi_0 = \Phi_0\chi_{00}$  und für den ersten angeregten Zustand nur  $\Psi_{\text{ortho}} = \Phi_{\ell m}^+\chi_{00}$  und  $\Psi_{\text{para}} = \Phi_{\ell m}^-\chi_{1m_s}$  möglich sind. Diskutieren Sie die möglichen Zustände im Para-Helium ( $S = 1$ ) und im Ortho-Helium ( $S = 0$ ). (20 P.)

## H::2 FREIWILLIGE ZUSTATZAUFGABE!

*Hundsche Regeln:* Die Abstoßung  $H'$  in H::1 wird nun in erster Ordnung Störungstheorie berücksichtigt.

- [1] Betrachten Sie das Verhalten der Ortsraumwellenfunktion für symmetrischen Spin ( $S = 1$ ) und  $\mathbf{r}^{(1)} \rightarrow \mathbf{r}^{(2)}$ . Argumentieren Sie damit, daß die Spin-Triplett-Zustände stärker gebunden sind als der Spin-Singlett-Zustand. Dies ist ein Spezialfall der *ersten Hundeschen Regel*, welche besagt, daß der Zustand mit maximalem Spin die niedrigste Energie hat.
- [2] Betrachten Sie qualitativ die mittlere Entfernung des Elektrons in Abhängigkeit vom Bahndrehimpuls  $\ell$ . Argumentieren Sie damit, daß die Zustände mit  $\ell = 1$  stärker gebunden sind als die mit  $\ell = 0$ . Dies ist ein Spezialfall der *zweiten Hundeschen Regel*, welche besagt, daß der Zustand mit maximalem Bahndrehimpuls die niedrigste Energie hat.
- [3] Zeigen Sie für die Matrixelemente von  $H'$  mit den ersten angeregten Zuständen, daß gilt:

$$\langle \Phi_{\ell m}^{\pi}\chi_{sm_s} | H' | \Phi_{\ell' m'}^{\pi'}\chi_{s' m'_s} \rangle = \delta_{\pi\pi'}\delta_{ss'}\delta_{m_s m'_s}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\langle \Phi_{\ell m}^{\pi}\chi_{sm_s} | H' | \Phi_{\ell m}^{\pi}\chi_{sm_s} \rangle.$$

- [4] Zeigen Sie, daß  $\langle \Phi_{\ell m}^{\pi}\chi_{sm_s} | H' | \Phi_{\ell m}^{\pi}\chi_{sm_s} \rangle$  nicht von  $m$  abhängt.
- [5] Berechnen Sie  $\langle \Phi_{\ell m}^{\pi}\chi_{sm_s} | H' | \Phi_{\ell m}^{\pi}\chi_{sm_s} \rangle$  explizit und überprüfen Sie so, ob [1] und [2] überhaupt gültig sind. (10 P.)