

Abgabe: bis zum 7. Dez. 2009, 10:00 Uhr im Postfach von Prof. Rieger

1 Wellenfunktion eines Zweielektronensystems: erste angeregte Zustände von He

Gegeben sei ein System von zwei wechselwirkenden Elektronen im Feld zweier im Ursprung fixierter Protonen. Im ersten Teil dieser Übung (Fragen 1-4) betrachten wir nur den Spinanteil der Gesamtwellenfunktion des Systems.

1) $|\alpha_i\rangle, |\beta_i\rangle$ ($i = 1, 2$) seien die Eigenvektoren des i -ten Einzelspinoperators S_{iz} :

$$S_{iz}|\alpha_i\rangle = \frac{\hbar}{2}|\alpha_i\rangle \quad , \quad S_{iz}|\beta_i\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\beta_i\rangle. \quad (8.1)$$

Konstruieren Sie ausgehend von $|\alpha_i\rangle, |\beta_i\rangle$ symmetrische und antisymmetrische (bezüglich Vertauschung der beiden Elektronen) Gesamtspinzustände.

Der Gesamtspinoperator \vec{S} ist gegeben durch $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$.

2) Sind die Spinzustände aus Frage 1 Eigenzustände von S_z ?

Falls "ja", wie lauten die zugehörigen Eigenwerte?

Falls "nein", wie lautet der Erwartungswert von S_z in diesen Zuständen?

3) Sind die Spinzustände aus Frage 1 Eigenzustände von S^2 ?

Falls "ja", wie lauten die zugehörigen Eigenwerte?

Falls "nein", wie lautet der Erwartungswert von S^2 in diesen Zuständen?

4) Sind die Spinzustände aus Frage 1 Eigenzustände von S_x ?

Falls "ja", wie lauten die zugehörigen Eigenwerte?

Falls "nein", wie lautet der Erwartungswert von S_x in diesen Zuständen?

Wie wollen nun den ersten angeregten Zustand des He-Atoms betrachten.

5) Wie sieht der Hamiltonoperator des Systems in der Born-Oppenheimer Näherung aus?

6) Wie sehen die möglichen Wellenfunktionen des Systems aus, unter der Annahme nicht wechselwirkender Elektronen?

7) Als Störungsterm wollen wir jetzt die Wechselwirkung der Elektronen berücksichtigen. Berechnen Sie in erster Ordnung Störungstheorie die ersten angeregten Zustände des He-Atoms. Welcher Entartungsgrad liegt vor?

2 Hubbardmodell bei halber Füllung

Wir wollen in dieser Übung die Stabilität des antiferromagnetischen Grundzustandes des Hubbardmodells für den Fall zweier Gitterplätze bei halber Füllung untersuchen. Der Hamiltonoperator des Modells ist gegeben durch:

$$H = H_t + H_U + H_V$$

$$H_t = -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^\dagger c_{1\sigma} \quad , \quad H_U = U(n_{1\uparrow}n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow}n_{2\downarrow}) \quad (8.2)$$

$$H_V = \frac{V}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma'}^\dagger c_{2\sigma'} c_{1\sigma}. \quad (8.3)$$

H_t ist dabei der Tunnelterm, H_U die lokale Hubbardwechselwirkung und H_V die Austauschwechselwirkung zwischen Nachbarn.

1) Ein System aus zwei Gitterplätzen kann maximal 4 Elektronen aufnehmen (Spin up und Spin down pro Gitterplatz). Schreiben Sie für den Zustand halber Füllung dieses Systems (2 Elektronen) die 6 Eigenzustände der lokalen Hubbardwechselwirkung H_U .

2) Zeigen Sie, warum 2 der Zustände aus 1) auch Eigenzustände von H sind.

3) Nutzen Sie die Antikommutatorregeln der fermionischen Operatoren um die Matrixelemente der verbleibenden 4 Zustände zu berechnen.

4) Bestimmen Sie alle Eigenwerte und die zugehörigen Eigenvektoren von H . Klassifizieren Sie die Eigenzustände anhand ihres Spins.

Hinweis : Die Form der 4×4 Matrix suggeriert eine unitäre Transformation, die das Problem auf Diagonalisierung einer 2×2 Matrix zurückführt.

5) Skizzieren Sie das Phasendiagramm in der $U/t - V/t$ -Ebene, d.h. den Bereich, in dem der Singlett-Grundzustand instabil wird gegenüber der Ausbildung eines spinpolarisierten ferromagnetischen Zustandes.