

Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I

WS 2018/19 – Übungsblatt 13

Ausgabe: Freitag 8. Februar, Besprechung: Freitag 15. Februar

1. Die zwei Fermionen im Kasten

Lassen Sie uns zum Abschluss noch einmal zum „Teilchen im Kasten“ zurückkehren. Betrachten Sie ein System, in dem sich zwei ungeladene Fermionen mit Spin $S = \frac{1}{2}$ im selben eindimensionalen Kasten befinden. Dabei werden die Positionen der beiden Fermionen mit x_1 und x_2 und ihre Spinkoordinaten mit σ_1 und σ_2 bezeichnet.

- a) Stellen Sie die erlaubten Zwei-Teilchen-Wellenfunktionen $\Psi(x_1, x_2, \sigma_1, \sigma_2)$ für den Fall, dass der Gesamtspin des Systems
 - i. Null
 - ii. Einsbeträgt, aus den Ein-Teilchen-Eigenfunktionen $\psi_n(x_1)$ und $\psi_{n'}(x_2)$ sowie den Spinfunktionen $\alpha(\sigma_1)$ und $\alpha(\sigma_2)$ bzw. $\beta(\sigma_1)$ und $\beta(\sigma_2)$ auf.
- b) Welche Werte müssen n und n' annehmen, damit die Energie des Zustands bei einem Gesamtspin von Null bzw. Eins so gering wie möglich ist?
- c) Bestimmen Sie die zugehörigen räumlichen Wahrscheinlichkeitsdichten $P(x_1, x_2)$.
- d) Wie verhalten sich die Wahrscheinlichkeitsdichten, wenn sich die beiden Fermionen am selben Ort aufhalten? Bringen Sie Ihre Beobachtungen mit den Begriffen „Fermi-Loch“ und „Fermi-Haufen“ in Verbindung.
- e) Stellen Sie die in Aufgabe 1c) bestimmten Wahrscheinlichkeitsdichten graphisch in Form von zweidimensionalen Contour-Diagrammen dar, gerne auch mit Hilfe des Computers.

2. Slater-Determinanten

Stellen Sie die Slater-Determinante des Lithiumatoms im elektronischen Dublett-Grundzustand unter Verwendung von Raumorbitalen und Spinfunktionen auf.