BLATT 6

SPIN IN MOLEKULAREN SYSTEMEN

AUFGABE 1: *Spinquantenzahlen I*

Betrachten Sie den Spin eines einzelnen, ungepaarten Elektrons und die zugehörigen Spinfunktionen $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$.

(a) Formulieren Sie Orthonormalitätsrelation für die Spinfunktionen $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$.

(b) $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ sind Eigenfunktionen der Spinoperatoren $\hat{s}_z$ und $\hat{S}^2$. Formulieren Sie die zugehörigen Eigenwertgleichungen und geben Sie die Eigenwerte explizit an.

(c) Welche physikalische Bedeutung haben die beiden Operatoren $\hat{s}_z$ und $\hat{S}^2$?

AUFGABE 2: *Spinquantenzahlen II*

(a) Das O_2-Molekül besitzt in seinem Grundzustand 2 ungepaarte Elektronen. Welches ist die totale Spinquantenzahl S, welches sind die möglichen Spinquantenzahlen der z-Komponente, M_S, was ist der Erwartungswert des Spinquadratoperators, $\langle\hat{S}^2\rangle$, sowie der Erwartungswert des z-Komponente des Spinoperators, $\langle\hat{S}_z\rangle$? Was ist die Spinmultiplizität des Zustands?

(b) Welche der folgenden Methoden ist geeignet, diesen Grundzustand formal korrekt zu beschreiben: RHF, ROHF, oder UHF? Welche dieser Methoden wird die geringste Energie prognostizieren und warum?

(c) Bei der UHF-Methode tritt das Problem der "Spinverunreinigung" auf. Was versteht man darunter? Wie kann man diese beseitigen?

AUFGABE 3: *Paulische Spin-Matrizen*

Die Paulischen Spinmatrizen,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

erlauben die Darstellung der Spinoperatoren im Spinraum $\mathcal{H}_{S=1/2}$ für Fermionen ($S = 1/2$) in der Basis der Eigenfunktionen $\{\alpha, \beta\}$ des Operators S_z:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad ,$$

d.h., es gilt für die Spinoperatoren $S_i = \frac{1}{2}\,\sigma_i \;\; , \;\; i = \{x, y, z\}$.

(a) Berechnen Sie die Eigenwerte von S_x und S_y.

(b) Bestimmen Sie die normierten Eigenfunktionen der Operatoren S_x und S_y und schreiben Sie diese in der Basis des Operators S_z, also als Linearkombination von $|\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\rangle$.

(c) Berechnen Sie, wie die sog. Leiteroperatoren $S_\pm = S_x \pm i S_y$ auf die Eigenfunktionen des S_z-Operators wirken.