

Dr. Marco Busch
 Institut für Physik
 Humboldt-Universität zu Berlin
 Brook-Taylor-Straße 6 (MHP)

Übungen zur Vorlesung „Mehrelektronenatome und Moleküle“

Blatt 3

(Abgabe: 04.11.2014 **VOR** der Vorlesung)

Aufgabe 5: (4 Punkte)

Zeigen Sie, dass für ein System von zwei Spin-1/2-Teilchen der Operator

$$P_{12} = \frac{1}{2} \left[\mathbb{I} + \frac{4}{\hbar^2} \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \right] = \frac{1}{2} [\mathbb{I} + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2]$$

(mit $\vec{\sigma}_i = 2\vec{s}_i/\hbar$ und dem Einheitsoperator \mathbb{I}) den Spinaustauschoperator darstellt. (Hinweis: Nutzen Sie die Wirkung der sphärischen Komponenten von $\vec{\sigma}_i$ auf die Ein-Teilchen-Spinfunktionen aus.) Für ein System von N Spin-1/2-Teilchen lässt sich mit den Zwei-Teilchen-Spinaustauschoperatoren P_{jk} das Quadrat des Operators des Gesamtspins angeben:

$$\vec{S}^2 = \left[A\mathbb{I} + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^N P_{jk} \right] \hbar^2$$

Bestimmen Sie die Größe A .

Aufgabe 6: (4 Punkte)

Geben Sie alle möglichen/erlaubten Terme für ein Zwei-Elektronen-System mit np^2 -, nd^2 - und n_1n_2 -Konfiguration bei LS-Kopplung an und begründen Sie Ihre Angaben. Leiten Sie die allgemeine Formel für die Gesamtzahl von Hyperfein-Zeeman-Zuständen für eine $n_1\ell_1n_2\ell_2$ -Konfiguration (mit $n_1 \neq n_2$) eines Zwei-Elektronen-Systems bei LS-Kopplung und einem Kernspin I ab.