

Aufgabe 7.1 Elektronenkonfiguration von Sauerstoff

Die Elektronen des Sauerstoffmoleküls werden in die Molekülorbitalzustände eingefüllt (Hund-Mullikan). Die Reihenfolge der Elektronenkonfiguration homonuklearer zweiatomiger Moleküle ist gegeben durch $\sigma_g 1s, \sigma_u^* 1s, \sigma_g 2s, \sigma_u^* 2s, \pi_u 2p, \sigma_g 2p, \pi_g^* 2p, \sigma_u^* 2p, \dots$; wobei \cdot^* nichtbindende Zustände bezeichnen. Der Grundzustand eines Moleküls findet man durch sukzessives Auffüllen von Orbitalen mit Elektronen.

- Gib die Aufspaltung der Atomorbitale $1s, 2s, 2p$ in Molekülorbitale an. Zeichne die dazugehörigen Wellenfunktionen schematisch und gib die Multiplizität von Bahn und Spin an.
- Wie lauten die Elektronenkonfigurationen der Moleküle O_2^+, O_2, O_2^- und O_2^{2-} ?
- Bestimme die Termsymbole $^{2S+1}\Lambda_{g,u}^\pm$ der Grundzustände für die Moleküle aus (b); $2S+1$ bezeichnet die Spinentartung, $\Lambda = \Sigma, \Pi, \Delta, \dots$ die Komponente des Bahndrehimpulses entlang der Kernverbindungsline, g, u die Parität unter Inversion am Symmetriezentrum und \pm die Symmetrie gegenüber Spiegelung an einer Ebene durch die Kernverbindungsline.
- Wie ändern sich die Elektronenkonfiguration und das Termsymbol beim energetisch tiefsten erlaubten Übergang von O_2 ?
Tipp: Die optischen Auswahlregeln sind gegeben durch: $\Delta\Lambda = 0, \pm 1, \Delta S = 0$ und $g \rightarrow u$ oder $u \rightarrow g$.

Aufgabe 7.2 Operator der Gesamtteilchenzahl

Seien $N = \sum_n a_n^\dagger a_n$ der Operator der Gesamtteilchenzahl und $H = \sum_n E_n a_n^\dagger a_n$ der Hamiltonoperator. Hier bezeichnen a_n^\dagger und a_n die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren.

- Zeige, dass der Operator der Gesamtteilchenzahl zeitlich konstant ist.
- Zeige, dass im Fall der Fermi-Dirac Statistik $N_n^2 = N_n := a_n^\dagger a_n$ gilt, d.h. dass nur ein Teilchen den Zustand $|n\rangle$ besetzen kann.

Aufgabe 7.3 Operatoren in zweiter Quantisierung

- Schreibe die folgenden Operatoren in ihrer zweitquantisierten Darstellung bezüglich der Basis ebener Wellen $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$:
 - die kinetische Energie T ,
 - die potentielle Energie in einem äusseren Feld $U(\mathbf{r})$ (bleibt der Impuls/die Energie der Teilchen erhalten?),
 - die Paarwechselwirkung V zwischen den Teilchen,
 - den Stromoperator $\mathbf{j}(\mathbf{r})$,
 - den Dichteoperator $\rho(\mathbf{r})$.
- Zeige, dass der Feldoperator $\Psi(\mathbf{x}, t)$ unter der Annahme, dass die Teilchen nur mit einem äusseren Potential $U(\mathbf{r})$ wechselwirken, die zeitabhängige Schrödingergleichung erfüllt.
- Betrachte den Zustand $a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{q}}^\dagger |0\rangle$ bestehend aus zwei Fermionen mit Impulsen \mathbf{p} und \mathbf{q} . Zeige, dass man die zugehörige Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ als eine Slater Determinante schreiben kann.