

Aufgabe 18

(3 Punkte)

Normalkoordinaten:

In der Vorlesung haben Sie die Normalkoordinaten für eine Kette von Oszillatoren hergeleitet. Zeigen Sie, dass die Vertauschungsrelationen $[x_k, p_{k'}^\dagger] = i\hbar\delta_{k,k'}$ gelten.

Aufgabe 19

(8 Punkte)

Spin-Bahn-Kopplung:

- (a) (3 Punkte) Betrachten Sie ein Elektronengas mit dem Hamiltonoperator

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + \alpha_P \vec{\sigma} \cdot \vec{P}, \quad (1)$$

wobei $\vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla}$ der Elektronen-Impulsoperator ist und $\vec{\sigma}$ der Vektor der Pauli-Spinmatrizen darstellt. Bestimmen Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren des Hamiltonoperators. Zeichnen Sie das Energiespektrum als Funktion des Impulses. Wie sind die Spinvektoren bezüglich der Impulsvektoren in den Eigenzuständen ausgerichtet?

- (b) (5 Punkte) Wiederholen Sie die Betrachtungen aus a) für den Hamiltonoperator

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + \alpha_R \left[\vec{\sigma} \times \vec{P} \right]_z. \quad (2)$$

Dieser Hamiltonoperator beschreibt die RASHBA-Spin-Bahn-Kopplung und ist wichtig für die Theorie zweidimensionaler Elektronengase.

Aufgabe 20

(9 Punkte)

Benzen-Ring:

Ein Benzen-Molekül ist aus sechs identischen Atomen $C_1, C_2, \dots, C_6$ aufgebaut, welche ein reguläres Hexagon formen. Von chemischen Standpunkt aus besitzt es 3 Doppelbindungen, d.h. 6 leicht bewegliche Außenelektronen. Wir wollen diese 6 Elektronen nun als unabhängig voneinander betrachten und ihr Energiespektrum bestimmen. Betrachten Sie dazu ein Elektron, das bei jedem der sechs Atome lokalisiert sein kann. Wir nennen den Zustand, bei dem das Elektron am n -ten Atom lokalisiert ist $|\phi_n\rangle$. Die Elektronenzustände seien auf die sechs Ortszustände $|\phi_n\rangle$ beschränkt, welche als orthogonal angenommen werden sollen (die Spinentartung dieser Zustände spielt für die folgende Berechnung nur insofern eine Rolle, als dass jeder Zustand mit zwei Elektronen besetzt werden kann).

- (a) (3 Punkte) Definieren Sie einen Operator R durch die folgenden Beziehungen: $R|\phi_1\rangle = |\phi_2\rangle$, $R|\phi_2\rangle = |\phi_3\rangle$, ..., $R|\phi_6\rangle = |\phi_1\rangle$. Finden Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren von R . Zeigen Sie, dass die Eigenvektoren von R eine Zustandsbasis bilden.
- (b) (6 Punkte) Vernachlässigt man die Wahrscheinlichkeit für das Elektron von einem Atom zum Nachbaratom zu hüpfen, so ist seine Energie durch einen Hamiltonoperator H_0 bestimmt, dessen Eigenzustände die sechs Zustände $|\phi_n\rangle$ sind, mit dem sechsfach entarteteten

Eigenwert E_0 . Wir beschreiben nun eine mögliche Hüpfbewegung des Elektrons zu benachbarten Atomen durch eine Störung W zum Hamiltonoperator H_0 . W ist durch die Beziehungen $W|\phi_1\rangle = -t|\phi_6\rangle - t|\phi_2\rangle$, $W|\phi_2\rangle = -t|\phi_1\rangle - t|\phi_3\rangle$, $\dots$, $W|\phi_6\rangle = -t|\phi_5\rangle - t|\phi_1\rangle$ gegeben. Zeigen Sie, dass R mit dem Hamiltonoperator $H = H_0 + W$ kommutiert. Bestimmen Sie daraus die Eigenzustände und Eigenwerte von H . Was ist die Grundzustandsenergie des Benzen-Moleküls, wenn man sechs Elektronen in die niedrigsten Zustände einfüllt? Beachten Sie dabei die Spinartung der Niveaus. Sind die Elektronen lokalisiert?