Dirac-Theorie, nicht-relativist. Grenzfall mit Spin-Bahn-Kopplung.

vollständiger Satz kommutierender Observablen: $\hat{H}, \hat{\underline{L}}^2, \hat{\underline{S}}^2, \hat{\underline{J}}^2, \hat{J}_z$

nicht mehr $\hat{L}_z, \hat{S}_z$, diese vertauschen nicht mit Spin-Bahn-Term!

Gesamtdrehimpuls — $\hat{\underline{J}} = \hat{\underline{L}} + \hat{\underline{S}}$ 2x2 Matrix

$\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$

früher (nicht-relativist. Fall)

Eigenzustände $|\varphi_0\rangle = |n,l,m\rangle\,|s,m_s\rangle$ entkoppelt

$s=\frac{1}{2}$, $m_s = \pm\frac{1}{2}$

Man findet für die neuen Eigenzustände:

$$|\varphi\rangle = |n, l, s=\tfrac{1}{2}, J, m_J\rangle$$

$$= \sum_{\substack{m, m_s \\ \text{mit } m+m_s=m_J}} C^{n\,l\,J}_{m_s\,m\,m_J} \underbrace{|n,l,m\rangle\,|s,m_s\rangle}_{|n,l,s,m,m_s\rangle}$$

Clebsch-Gordan-Koeffizienten (Tabellen!)

(Wigner-Matrizen (nach Multiplikation mit Vorfaktor)

Quantenzahl J gehört zu $\hat{\underline{J}}^2$, m_J zu J_z

$\hat{\underline{J}}^2|\varphi\rangle = \hbar J(J+1)|\varphi\rangle$

$J_z|\varphi\rangle = \hbar m_J|\varphi\rangle$

Bemerkung:

Die bisherigen Betrachtungen können auf allgemeine Gesamt-Drehimpulse $\hat{\underline{J}} = \hat{\underline{J}}_1 + \hat{\underline{J}}_2$ angewendet werden (E. Wigner)

Es gilt immer die sogenannte Dreiecksungleichung:

Steckt in den Clebsch-Gordan-Koeffizienten

$$\begin{cases} |J_1 - J_2| \le J \le |J_1 + J_2| \\ -|J_1 - J_2| \le m_J \le |J_1 - J_2| \end{cases}$$

Hier J_1 ist Quantenzahl zu $\hat{\underline{J}}_1^2$, analog J_2

Speziell im Fall Bahndrehimpuls, Elektronenspin ($J_1 = l$, $J_2 = \frac{1}{2} = s$)

$$|l - \tfrac{1}{2}| \le J \le l + \tfrac{1}{2}$$

b) Beiträge der relativistischen Korrekturen beim Wasserstoffatom

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + \underbrace{\phi_{Kern}(r)}_{\text{Coulombpotential}}, \quad \hat{H}_0|\varphi_0\rangle = E_0|\varphi_0\rangle, \quad E_0 = -\frac{R_H}{n^2}$$

Ziel: Berechnung der relativist. Korrekturen in Störungstheorie 1. Ordnung!

d.h.: betrachte Erwartungswert der Korrekturterme in den ungestörten Zuständen!

$$\langle \varphi_0 | \left(\hat{H}^{rel}_{kin} + \hat{H}^{rel}_{Darwin} + \hat{H}^{rel}_{SB} \right) | \varphi_0 \rangle$$

eigentlich: $|\varphi_0\rangle = |n, l, m, s=\frac{1}{2}, m_s\rangle$, $\hat{H}_0 |\varphi_0\rangle = E_0 |\varphi_0\rangle$

es gilt aber auch

$$\hat{H}_0 \underbrace{|n, l, s=\tfrac{1}{2}, J, m_J\rangle}_{\text{Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses}} = E_0 |n, l, s=\tfrac{1}{2}, J, m_J\rangle \quad !!$$

(diese haben aber noch nicht die richtige radiale Abhängigkeit)

Nehme diese Zustände zur Auswertung der Erwartungswerte!

(Beachte: Das ist immer noch eine Näherung, da radiale Abhängigkeit wie im ungestörten Problem!)

Man findet (genaue Rechnung siehe Übung):

$$\hat{H}^{SB} \sim \underline{\hat{L}} \cdot \underline{\hat{S}} \times \frac{1}{r^3}$$

$$\langle \hat{H}_{SB} \rangle = \langle n, l, s=\tfrac{1}{2}, J, m_J | \hat{H}_{SB} | n, l, s=\tfrac{1}{2}, m_J, J \rangle$$

$$= \begin{cases} \frac{\alpha^2}{2n} |E_n| \frac{1}{(l+\frac{1}{2})(l+1)} & , J = l+\frac{1}{2} \quad , l \neq 0 \\ -\frac{\alpha^2}{2n} |E_n| \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})} & , J = l-\frac{1}{2} \quad , l \neq 0 \\ 0 & , l = 0 \end{cases}$$

$$E_n = E_0 = -\frac{R_H}{n^2} \quad R_H \text{ – Rydbergkonstante}$$

$$\alpha = \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0 c\hbar} = \frac{1}{137} \quad \text{„Feinstrukturkonstante"}$$

$\Rightarrow$ $\alpha^2 |E_n|$ ist klein gegenüber E_n (so wie man es von einem Korrekturterm erwartet!)

ähnliche Berechnung für $\hat{H}^{rel}_{Darwin}$, $\hat{H}^{rel}_{kin}$

führt zu einer Energieerhöhung (nur relevant für $l=0$!)

führt zu einer Energieabsenkung relativ zu E_n

Gesamtergebnis für relativistische Korrektur

$$\langle \hat{H}^{rel} \rangle = \Delta E$$

Energieänderung durch die drei relativist. Terme

$$= -\frac{\alpha^2}{4n^2} |E_n| \left(\frac{4n}{J+\frac{1}{2}} - 3 \right) \qquad l \neq 0 \text{ (check!)}$$

Bemerkungen:

- die Korrektur ist insgesamt negativ $\rightarrow$ Energieabsenkung
- die Korrektur hängt von den Quantenzahlen n und J ab!
- Da zu jedem l 2 Werte für J vorliegen ($J = l \pm \frac{1}{2}$), findet man zu jedem l zwei Energieniveaus $\rightarrow$ „Dublettstruktur"
- Es gibt noch zwei weitere Effekte, die wir hier nicht betrachtet haben, die aber ebenfalls zu Aufspaltung und Verschiebung der Energieniveaus führen:
  - Hyperfeinwechselwirkung:
    Kopplung zw. dem magnetischen Moment des Kerns (Kernspin!) mit dem durch das Elektron erzeugte Magnetfeld
  - „Lamb-Shift"
    quantenelektrodynamischer Effekt (Wechselwirkung mit Vakuumsfluktuation)
    $\hookrightarrow$ führt zu einer sehr kleinen Korrektur des Coulombpotentials

II. Vielteilchensysteme

bisher: Fokus auf Ein-Teilchen-Systeme (z.B. Ein-Elektron-System)

Jetzt: N Teilchen $i=1,\dots,N$

Wir konzentrieren uns auf den nicht-relativist. Fall

Grundfragen: – Wie beschreibt man solche Vielteilchensysteme?
– Näherungsmethoden?

II.1 Unterscheidbare Teilchen

„unterscheidbar" $\hat{=}$ Teilchen, die sich durch irgendeine physikalische Eigenschaft (Masse, Ladung, Spin) voneinander unterscheiden

$\Longleftrightarrow$ Teilchen sind „nummerierbar" („markierbar")

$\Longleftrightarrow$ durch eine geeignete Messung ist es möglich, die Teilchen zu identifizieren

Beschreibung N unterscheidbarer quantenmechan. Teilchen?

Annahme: Keine Wechselwirkungen!

$$\Rightarrow \hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\hat{H}^{(i)}}$$

Einteilchen-Hamiltonian, „lebt" im Einteilchen-Hilbertraum $\mathcal{H}^{(i)}$

$$\text{mit } \hat{H}^{(i)} = \frac{\hat{p}^2}{2m_i} + \underbrace{V_i(x_i)}$$

externes Potential, z.B. Wechselwirkung mit externem Feld

Einteilchen-$\underbrace{\text{Schrödinger-Gl.}}_{SG}$, zeitunabhängig

$$\hat{H}^{(i)} |\phi^{(i)}_{\alpha_i}\rangle = \varepsilon_{\alpha_i} |\phi^{(i)}_{\alpha_i}\rangle$$

α_i : Quantenzahl, die zur Energie ε_{α_i} des Teilchens i gehört

(z.B. $\alpha = p$, $\alpha = l, \ldots$)

Vielteilchenzustand (Eigenzustand von $\hat{H}$) ist ein „direktes" Produkt aus Einteilchenzuständen

$$|\phi_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_N}\rangle = |\phi^{(1)}_{\alpha_1}\rangle|\phi^{(2)}_{\alpha_2}\rangle \ldots |\phi^{(N)}_{\alpha_N}\rangle$$

Ortdarstellung:

$$\langle \underline{r}_1\underline{r}_2 \ldots \underline{r}_N|\phi_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_N}\rangle = \phi_{\alpha_1}(\underline{r}_1)\,\phi_{\alpha_2}(\underline{r}_2)\ldots\phi_{\alpha_N}(\underline{r}_N)$$

Einsetzen in die N-Teilchen SG

$$\hat{H}|\phi_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_N}\rangle = \sum_{i=1}^{N}\hat{H}^{(i)}|\phi_{\alpha_1\ldots\alpha_N}\rangle = \sum_{i=1}^{N}\hat{H}^{(i)}|\phi^{(1)}_{\alpha_1}\rangle|\phi^{(2)}_{\alpha_2}\rangle\ldots|\phi^{(N)}_{\alpha_N}\rangle$$

Jeder Einteilchen-Hamiltonian $\hat{H}^{(i)}$ wirkt nur auf „sein" (das i-te) Teilchen!

$$= \Big(\underbrace{\hat{H}^{(1)}|\phi^{(1)}_{\alpha_1}\rangle}_{\varepsilon_{\alpha_1}|\phi^{(1)}_{\alpha_1}\rangle}\Big)|\phi^{(2)}_{\alpha_2}\rangle\ldots|\phi^{(N)}_{\alpha_N}\rangle$$
$$+ |\phi^{(1)}_{\alpha_1}\rangle\Big(\hat{H}^{(2)}|\phi^{(2)}_{\alpha_2}\rangle\Big)\cdot|\phi^{(3)}_{\alpha_3}\rangle\ldots|\phi^{(N)}_{\alpha_N}\rangle$$
$$+ \ldots + |\phi^{(1)}_{\alpha_1}\rangle\ldots|\phi^{(N-1)}_{\alpha_{N-1}}\rangle\hat{H}^{(N)}|\phi^{(N)}_{\alpha_N}\rangle$$

benutze überall die Einteilchen-SG

$$= (\varepsilon_{\alpha_1} + \varepsilon_{\alpha_2} + \ldots + \varepsilon_{\alpha_N})|\phi^{(1)}_{\alpha_1}\rangle\ldots|\phi^{(N)}_{\alpha_N}\rangle$$

Damit gezeigt:
- Der direkte Produktzustand ist Eigenzustand von $\hat{H}$ (unterscheidbare Teilchen, keine Wechselwirkung!)
- die Gesamtenergie ist $E = \sum_{i=1}^{N}\varepsilon_{\alpha_i}$

Weitere Bemerkungen:

- Die Vielteilchenzustände $|\phi_{\alpha_1\ldots\alpha_N}\rangle$ „leben" im Produktraum

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}^{(N)}$$

• Orthogonalität und Vollständigkeit

$$\langle \Phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N} | \Phi_{\beta_1 \dots \beta_N} \rangle = \delta_{\alpha_1, \beta_1} \dots \delta_{\alpha_N, \beta_N}$$

und $$\sum_{\alpha_1 \dots \alpha_N} | \Phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N} \rangle \langle \Phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N} | = \hat{1}$$

II.2. Nicht-unterscheidbare (identische) Teilchen

Definition:
nicht-unterscheidbare Teilchen stimmen in allen ihren Teilcheneigenschaften überein

Die Meßwerte physikalischer Observablen (z.B. Energien) können auch in einem System identischer Teilchen unterschiedlich sein

Beispiel: Identische Elektronen in einem Festkörper können unterschiedl. Energie haben
aber: Jedes Elektron kommt für jeden Energiezustand in Frage!
Man weiß nicht, welches Elektron welchen Energiezustand „besetzt"!
$\Longleftrightarrow$ man kann die Elektronen nicht „markieren"!

Das ist ein fundamentaler Unterschied zu klass. Teilchen.
Durch Messung der Koordinaten, Impulse aller Teilchen kann man diese „verfolgen" und zu jedem Zeitpunkt unterscheiden!

Dagegen:
In der Quantenmechanik haben die Teilchenzustände <u>intrinsisch</u> statistischen Charakter!
(Keine Markierung möglich)

Folgerungen für formale Beschreibung des Vielteilchensystems?

• Für echt quantenmechan. Vielteilchensystem (identische Teilchen) sind Zuordnungen der Art

$$\text{Teilchen } i \Longleftrightarrow \text{Zustand } |\phi_{\alpha_i}^{(i)}\rangle$$

bedeutungslos!

Statt dessen "pauschale" Zuordnung:

Teilchen $i = 1, \dots, N \iff$ N-Teilchenzustand $|\Phi_N\rangle$ zu

Frage: Was sind die zulässigen Zustände $|\Phi_N\rangle$?

Idee: $|\Phi_N\rangle$ ist eine Kombination von direkten Produkten aus Einteilchenzuständen!

Forderung: Erwartungswerte von Observablen, die von allen Teilchen abhängen (z.B. Gesamtenergie) müssen invariant gegenüber Vertauschung von Teilchenindizes sein!

Konkret: Betrachte Observable $\hat{A}_N$

$$\boxed{\begin{aligned} \langle \Phi_N | \hat{A}_N | \Phi_N \rangle &= \langle \dots \phi_{\alpha_i}^{(i)} \dots \phi_{\alpha_j}^{(j)} \dots | \hat{A}_N | \dots \phi_{\alpha_i}^{(i)} \dots \phi_{\alpha_j}^{(j)} \rangle \\ &\overset{!}{=} \langle \dots \phi_{\alpha_i}^{(j)} \dots \phi_{\alpha_j}^{(i)} \dots | \hat{A}_N | \dots \phi_{\alpha_i}^{(j)} \dots \phi_{\alpha_j}^{(i)} \rangle \end{aligned}} \quad (*)$$

Fordere also Invarianz gegenüber Vertauschung der Teilchenindizes i, j !

Führe ein:

Permutationsoperator: $\hat{P} | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \dots \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle = | \phi_{\alpha_1}^{(i_1)} \dots \phi_{\alpha_N}^{(i_N)} \rangle$

(allgemeine Permutation, die die Verteilung der Teilchen über die Einteilchenzustände ändert

$i = 1, 2, \dots, N \rightarrow (i_1, i_2, \dots i_N)$)

Jede allgemeine Permutation lässt sich auf Produkte von Vertauschungen zweier Teilchen zurückführen (spezielle Permutation)

also $\hat{P} = \underbrace{\prod}_{\text{Produkt}} \hat{P}_{ij}$

mit $\underbrace{\hat{P}_{ij}}_{\text{Transpositionsoperator}} |\ldots \phi^{(i)}_{\alpha_i} \ldots \phi^{(j)}_{\alpha_j} \ldots \rangle = |\ldots \phi^{(j)}_{\alpha_i} \ldots \phi^{(i)}_{\alpha_j} \ldots \rangle$

es gilt: $\hat{P}_{ij} \hat{P}_{ij} = 1 \iff \hat{P}_{ij} = \hat{P}_{ij}^{-1}$

(außerdem: $\hat{P}_{ij}^{+} = \hat{P}_{ij}$

$\Rightarrow$ Aus (*) : $\boxed{\langle \hat{P}_{ij} \phi_N | \hat{A}_N | \hat{P}_{ij} \phi_N \rangle \overset{!}{=} \langle \phi_N | \hat{A}_N | \phi_N \rangle}$