

Dirac-Theorie, ^{nicht-relativ} Grenzfall mit Spin-Bahn-Kopplg.

vollständig Satz kommutierende Operatoren: $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{S}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$

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

z.B. \hat{L}_z, \hat{S}_z
 diese vertauscht nicht mit Spin-Bahn-Term!

früher (nicht-relativ. 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:

$$|\varphi\rangle = |n, l, s, J, m_J\rangle$$

$$= \sum_{m, m_s} C_{m, m_s}^{n, l, J} \frac{|n, l, m\rangle |s, m_s\rangle}{|n, l, s, m, m_s\rangle}$$

Quantenzahl J gleich zu \hat{J}^2, m_J zu \hat{J}_z
 $\hat{J}^2 |\varphi\rangle = \hbar^2 J(J+1) |\varphi\rangle$
 $\hat{J}_z |\varphi\rangle = \hbar m_J |\varphi\rangle$

Clebsch-Gordan-Koeffizienten (Tabellen!)
 (Wigner-Koeffizienten nach Kugelharmonischen mit Vorzeichen)

Bemerkung:

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

Es gilt immer die sogenannte Dreiecksungleichung:

Setzt in den Clebsch-Gordan-Koeffizienten

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

hier J_1 ist Quantenzahl zu \hat{J}_1^2 analog J_2

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

$$|l - \frac{1}{2}| \leq J \leq l + \frac{1}{2}$$

b) Beträge der relativistischen Korrektur beim Wasserstoffatom

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

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

dazu: betrachte Erwartungswerte der Korrekturterme in den ungestörten Zuständen!

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

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

es gilt aber auch

$$\hat{H}_0 |n, l, s=\frac{1}{2}, J, m_J\rangle = E_0 |n, l, s=\frac{1}{2}, J, m_J\rangle \quad !!$$

Eigenzustände des Gesamtdrehimpulses (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):

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

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

$$\hat{H}_{SB} \sim \frac{1}{r^3} \times \frac{1}{r^3}$$

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

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = \frac{1}{137} \quad \text{--- "Feinstrukturkonstante"}$$

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

ähnliche Berechnung für \hat{H}_{Diamm} , \hat{H}_{kin}

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

führt zu einer Energiekorrektur relativ zu E_n

Serantengleichnis für relativistische Korrekturen

$$\langle \hat{H}^{\text{rel}} \rangle = \Delta E \quad \text{Energieänderung durch die dir. relativ. Term}$$

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

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 ebenfalls zu Aufspaltung und Verschiebung der Energieniveaus führen:
 - Hyperfeinwechselwirkung:
 - Kopplung zur dem magnetischen Moment des Kerns (Nucleonspin!) mit dem durch das Elektron erzeugte Magnetfeld
 - „Lamb-Stift“
 - quantenelektrodynamischer Effekt (Wechselwirkung mit Vakuumfeldern)
 - \hookrightarrow führt zu einer sehr kleinen Korrektur des Coulombpotentials

II. Vielteilchensysteme

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

Ziel: N Teilchen inkl., N

Wie vorgehen was auf der nicht-relativist. Teil

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

\Leftrightarrow Teilchen sind „nummerierbar“ („markierbar“)

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

Beschreibung N unterschiedbarer quantenmechan. Teilchen?

Annahme: Keine Wechselwirkungen!

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

Ein-Teilchen-Hamiltonian, „lebt“ im Ein-Teilchen-Hilbertraum $\mathcal{H}^{(i)}$

$$\text{mit } \hat{H}^{(i)} = \frac{\hat{p}^2}{2m_i} + \underbrace{V_i(\mathbf{r}_i)}_{\text{externes Potential, z.B. Wechselwirkung mit externem Feld}}$$

Ein-Teilchen-Schwingungsf., Zeitunabhängig
SG

$$\hat{H}^{(i)} | \phi_{\alpha_i}^{(i)} \rangle = E_{\alpha_i} | \phi_{\alpha_i}^{(i)} \rangle$$

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

(z.B. $\alpha = f, \alpha = l, \dots$)

Vielteilchenzustand (Eigenzustand von \hat{H}) ist ein „direktes“ Produkt aus Einzelteilchenzuständen

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

Alternativ:

$$\langle n_1 n_2 \dots n_N | \phi_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_N} \rangle = \phi_{\alpha_1}^{(n_1)} \phi_{\alpha_2}^{(n_2)} \dots \phi_{\alpha_N}^{(n_N)}$$

Einsetzen in die N -Teilchen SG

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

Jeder Einzelteilchen-Hamiltonian $\hat{H}^{(i)}$ greift nur auf „sein“ (den i -te) Teilchen!

$$\begin{aligned} &= \underbrace{E_{\alpha_1}(\phi_{\alpha_1}^{(1)})}_{\hat{H}^{(1)} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle} |\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \\ &+ |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \underbrace{E_{\alpha_2}(\phi_{\alpha_2}^{(2)})}_{\hat{H}^{(2)} |\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle} |\phi_{\alpha_3}^{(3)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \\ &+ \dots + |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_{N-1}}^{(N-1)}\rangle \underbrace{E_{\alpha_N}(\phi_{\alpha_N}^{(N)})}_{\hat{H}^{(N)} |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle} \\ &= (E_{\alpha_1} + E_{\alpha_2} + \dots + E_{\alpha_N}) |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \end{aligned}$$

brauche überall die Einzelteilchen-SG

Damit gezeigt =

- Der direkte Produktzustand ist Eigenzustand von \hat{H} (unterscheidbare Teilchen, keine Wechselwirkungen)

- die Gesamtenergie ist $E = \sum_{i=1}^N E_{\alpha_i}$

Weitere Bemerkungen:

• Die Vielteilchenzustände $|\phi_{\alpha_1 \dots \alpha_N}\rangle$ „leben“ im Produktraum

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

- Orthogonalität und Vollständigkeit

$$\langle \phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} | \phi_{\beta_1, \dots, \beta_N} \rangle = \int_{\alpha_1, \beta_1} \dots \int_{\alpha_N, \beta_N}$$

$$\text{und } \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} | \phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} \rangle \langle \phi_{\alpha_1, \dots, \alpha_N} | = \hat{1}$$

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 bei 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 welcher Energiezustand „besetzt“!

\Leftrightarrow 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 intrinsisch statistische Charakter!

(Keine Markierung möglich)

Folgerung für formale Beschreibung des Vielteilchensystems?

- Teilchen sind erst quantenmechan. Vielteilchensystem (identische Teilchen) sind Zuordnungen der Art

$$\text{Teilchen } i \Leftrightarrow \text{Zustand } | \phi_{i\alpha}^{(i)} \rangle$$

bedeutungslos!

Statt dieser "paarweise" Zuordnung:

$$\text{Teilchen } i=1, \dots, N \iff N\text{-Teilchen-Zustand } |\Phi_N\rangle \in \mathcal{H}_N$$

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

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

Forderung also lineare gegenseitige Vertauschung der Teilchenindizes i, j !

Führe ein:

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

allgemeine Permutation, die die Vertauschung der Teilchen über die Einteilchenzustände ausführt
 $i=1, 2, \dots, N \rightarrow (i_1, i_2, \dots, i_N)$

Jede allgemeine Permutation lässt sich auf Produkt von Vertauschungen
 (spezielle Permutation)
 Zwei Teilchen zurückföhren

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

$$\text{mit } \hat{P}_{ij} | \dots \phi_{\alpha_i}^{(i)} \dots \phi_{\alpha_j}^{(j)} \dots \rangle = | \dots \phi_{\alpha_i}^{(j)} \dots \phi_{\alpha_j}^{(i)} \dots \rangle$$

Transpositionsglieder

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

$$\text{(auf beiden: } \hat{P}_{ij}^{\dagger} = \hat{P}_{ij}$$

$$\Rightarrow \text{Aus } \textcircled{*} : \boxed{\langle \hat{P}_{ij} \phi_N | \hat{A}_N | \hat{P}_{ij} \phi_N \rangle = \langle \phi_N | \hat{A}_N | \phi_N \rangle}$$