

3.4. Vielteilchenzustände Schrödingerfeld

Ziel: Orb / Spin - Darstellg. der Wellenfunktion

Suchen $\phi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \langle x_1 \dots x_i \dots x_N | u_1 \dots u_\lambda \dots u_{N_0} \rangle$

$$x_i = \vec{r}_i, \vec{s}_i \quad (m_{s_i} = \pm \frac{1}{2}) \quad \hat{=} \text{Notation} \quad \uparrow \text{Modenzahl}$$

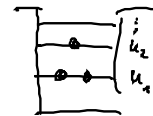
Teilchen an Ort \vec{r}_i im Spinzustand u_{s_i}

N : Anzahl der Teilchen

$$a) |u_1, u_2, \dots, u_\lambda, \dots\rangle = \prod_\lambda \frac{a_\lambda^{+ n_\lambda}}{\sqrt{n_\lambda!}} |0\rangle$$

$\leftarrow n_\lambda$ Teilchen im Modus λ
 \nearrow Produktzustände weil nicht gewechselt werden
 \nearrow Normierung
 \nwarrow Vakuumzustand $|0, 0, 0, \dots\rangle$

$$\sum_\lambda n_\lambda = N \quad \hat{=} \text{feststehende Zahl } N$$



$$b) \text{ WSK: } a_\lambda^{\dagger}(t) = \int dx \vec{\varphi}_\lambda(x) \cdot \vec{\psi}(x, t) \quad ; \quad x = \vec{r}_i, \vec{s}_i \quad ; \quad \int dx = \int d\vec{r} \sum_{\vec{s}}$$

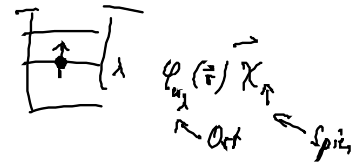
wähle $\vec{\varphi}_i(x)$ als Eigenfkt. d. Ortsoperators wähle:

$$\vec{\varphi}_i(x) \rightarrow \varphi_i(\vec{r}) \vec{\chi}_{m_{s_i}} = \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \vec{\chi}_{m_{s_i}}$$

$$|x_1 \dots x_i \dots x_N\rangle = \prod_i \frac{\psi^{\dagger}(x_i, t)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |0\rangle \quad \text{mit: } \psi = \psi(\vec{r}_i, m_{s_i}, t)$$

3.4.1. Einkörper Wellenfunktion (Fermion + Boson identisch)

Suche : $\langle x_1 | 0, 0, 0 \dots 1, \dots \rangle$



Frage: was ist Ortswellenfunktion f. Teilchen bei \vec{r}_1 mit Spin m_s

a) Einmutterzustand mit 1 Teilchen

$$|0, 0 \dots 1\rangle = a_1^\dagger |0\rangle \quad \text{BIF}$$

$$\text{Normierung: } \langle 0 | a_1 a_1^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | 1 \pm \underbrace{a_1^\dagger a_1}_0 | 0 \rangle = 1$$

$$\text{Ort/Spinwellenfkt: } \phi(x_1) = \langle x_1 | 0 \dots 1 \dots \rangle$$

$$= \langle 0 | \psi(x_1) a_1^\dagger | 0 \rangle$$

$$= \langle 0 | \sum_{\lambda'} \psi_{\lambda'}(x_1) a_{\lambda'} a_1^\dagger | 0 \rangle \quad \text{Normalordung herstellen!}$$

$$= \sum_{\lambda'} \langle 0 | \psi_{\lambda'}(x_1) (\delta_{\lambda\lambda'} a_1^\dagger a_{\lambda'} + \dots) | 0 \rangle = \psi_{\lambda}(x_1)$$

$\psi_{\lambda}(x_1)$ = Teilchen im Zustand $\lambda = n, m_s$ mit Koordinate x_1 :

\uparrow \uparrow
 Ort Spin

$\psi_{n, m_s}(\vec{r}_1) \chi_{m_s}$ $\hat{=}$ Eigenzustand von $H_0^{(1)}$

b) Vielteilchenzustand:

$$|1 \text{ Anreg.} \rangle \equiv |1\rangle = \sum_{\lambda} c_{\lambda} a_{\lambda}^\dagger |0\rangle \quad \hat{=} \text{Überlagerg. von Einkörperzuständen}$$

$$\sum_{\lambda} |c_{\lambda}|^2 = 1 \quad (\text{Wahrscheinlichkeit})$$

$$\phi(x_1) = \sum_{\lambda} c_{\lambda} \varphi_{\lambda}(x_1) \quad \text{Überlagerung v. Eigenzuständen von } H_0^{(1)}$$

3.4.2 Zweiteilchen Wellenfunktion f. Fermionen

$$|1 \dots 1 \dots \rangle = a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2}^+ |0\rangle \quad \lambda_1 \neq \lambda_2, \text{ sonst } 0$$

Normierung:

$$\langle 0 | a_{\lambda_2} a_{\lambda_1} a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2}^+ | 0 \rangle = \langle 0 | a_{\lambda_2} (1 - a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_1}) a_{\lambda_2}^+ | 0 \rangle$$

Normal-
ordnung
mm

$$\langle 0 | \underbrace{(1 - a_{\lambda_2}^+ a_{\lambda_2})}_{\text{mm}} - a_{\lambda_2} a_{\lambda_1}^+ (\underbrace{\delta_{\lambda_1 \lambda_2} - a_{\lambda_2}^+ a_{\lambda_1}}_{\text{mm}}) | 0 \rangle$$

mm
mm

0

$$= \langle 0 | 1 - a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_1}^+ \underbrace{\delta_{\lambda_1 \lambda_2}}_{\lambda_1 \neq \lambda_2} | 0 \rangle = 1$$

Orb-/Spin darstellg.:

$$|x_1, x_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi^+(x_1) \psi^+(x_2) |0\rangle$$

gesucht: $\phi(x_1, x_2) = \langle x_1, x_2 | \dots 1 \dots 1 \dots \rangle$
 $= \langle x_1, x_2 | a_{x_1}^+ a_{x_2}^+ | 0 \rangle$

Übungsfrage

$$\phi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\underbrace{\varphi_{x_1}(x_1) \varphi_{x_2}(x_2)}_{\text{Produktzustand}} - \underbrace{\varphi_{x_2}(x_1) \varphi_{x_1}(x_2)}_{\text{stellt den unterschied ber- keit der Teilchen sicher}} \right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_{x_1}(x_1) & \varphi_{x_1}(x_2) \\ \varphi_{x_2}(x_1) & \varphi_{x_2}(x_2) \end{vmatrix}$$

Spin-Statistik Theorem ist in 2. Quantifiz. erhalten.

in der Formel. $x = (\vec{r}, m_s)$ wird gleichzeitig vertauscht

Einweg. Notation: $\varphi_1(x) = \varphi_n(\vec{r}) \cdot \vec{\chi}_{m_s}$ $\lambda = (n, m_s)$

Setze: $m_{s_i} \equiv s_i$

$$\vec{\phi}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_{n_1}(\vec{r}_1) \vec{\chi}_{s_1}(s_1) \varphi_{n_2}(\vec{r}_2) \vec{\chi}_{s_2}(s_2) - \varphi_{n_2}(\vec{r}_1) \vec{\chi}_{s_2}(s_1) \varphi_{n_1}(\vec{r}_2) \vec{\chi}_{s_1}(s_2) \right)$$

Fermion: $\phi(x_1, x_2) = -\phi(x_2, x_1)$

$$|\phi|^2 = \text{unverändert}$$

3.4.3. Alternative Formulierung f. Zweiteilchen WF (Fermionen)

oft ist es nötig Gesamtsystem aus der Wellenfunktion zu sehen:

Versuch: $\phi =$ Bahnanteil und Spinanteil

unter Berücksichtigung der Antisymmetrie:

ein Anteil ω_B antisymmetrisch, der andere symmetrisch

↳ Konstruktion v. symmetrisch / antisymmetrisch Spinfunktionen:

$$\vec{\chi}_{\pm}(s_1, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\vec{\chi}_{s_1}(s_1) \vec{\chi}_{s_2}(s_2) \overset{\text{symmetrisch}}{+} \vec{\chi}_{s_2}(s_1) \vec{\chi}_{s_1}(s_2) \overset{\text{antisymmetrisch}}{-} \right)$$

analog Bahnanteil:

$$\varphi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_{u_1}(\vec{r}_1) \varphi_{u_2}(\vec{r}_2) \overset{+}{-} \varphi_{u_2}(\vec{r}_1) \varphi_{u_1}(\vec{r}_2) \right)$$

$$\Rightarrow \text{Gesamtwellenfkt: } \phi_{\pm} = \varphi_{\pm} \vec{\chi}_{\mp}, \quad \phi_{\mp} = \varphi_{\mp} \vec{\chi}_{\pm}$$

Spezialfall gleich Quantenzahlen:

$$\underbrace{\vec{\chi}_s(s_1) \vec{\chi}_s(s_2)}_{\text{symmetrisch}} \underbrace{\varphi_{-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}_{\text{antisymmetrisch}}, \text{ oder:}$$

$$\underbrace{\varphi_{+}(\vec{r}_1) \varphi_{+}(\vec{r}_2)}_{\text{symmetrisch}} \underbrace{\vec{\chi}_{-}(s_1, s_2)}_{\text{antisymmetrisch}}$$

2 Dinge wären zu zeigen:

a) Die Funktionen $\varphi_{+} \vec{\chi}_{-}$, $\varphi_{-} \vec{\chi}_{+}$, $\vec{\chi}_{+} \vec{\chi}_{-} \varphi_{-}$, $\varphi_{+} \vec{\chi}_{-}$ können an $\phi(x_1, x_2)$ erzeugt werden und beinhalten den ganzen Raum

b) Was bedeutet $\varphi_{+} \vec{\chi}_{-}$... physikalisch?

zu a) $\vec{\chi}_s(s_1) \vec{\chi}_s(s_2) \varphi_{-}$ und $\varphi_{+}(\vec{r}_1) \varphi_{+}(\vec{r}_2) \vec{\chi}_{-}$

sieht man durch Einsetzen in $\phi(x_1, x_2)$,

etwas schöner ist $\varphi_{+} \vec{\chi}_{-}$:

$$\varphi_{+} \vec{\chi}_{-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_{u_1}(\vec{r}_1) \varphi_{u_2}(\vec{r}_2) + \varphi_{u_2}(\vec{r}_1) \varphi_{u_1}(\vec{r}_2) \right) \left(\vec{\chi}_{\frac{1}{2}}(s_1) \vec{\chi}_{\frac{3}{2}}(s_2) - \vec{\chi}_{\frac{3}{2}}(s_1) \vec{\chi}_{\frac{1}{2}}(s_2) \right)$$

$\phi(x_1, x_2) \hat{=}$

$$i\hbar \phi(x_1, x_2) \hat{=} \overbrace{\hspace{15em}} \\ u_1 \leftrightarrow u_2$$

Die faktoriisierte WF sind im Slaterdeterminanten ansatz enthalten.

b) physikalischer Inhalt

Kompakte Formulierung in χ_{\mp} macht es ungl. nach

Quantenzahlen des Gesamtspins zu klassifizieren:

$$\begin{matrix} \text{Spin} \\ \text{QZ} \end{matrix} : s_1 = \frac{1}{2}, s_2 = \frac{1}{2} \implies S = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 0, 1$$

Well. fkt. mit Gesamtspin $S = 0, 1$.

$$M_{S=0} = 0, \quad M_{S=1} = \{0, \pm 1\}$$

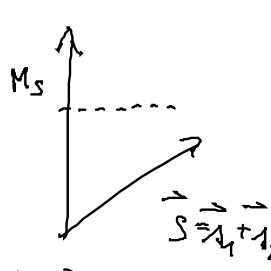
\rightarrow 4 linear unabhängige Wellenfunktionen

$$\{ \underset{==}{|S, M_S\rangle} \} \hat{=} \{ |0, 0\rangle, |1, 0\rangle, |1, 1\rangle, |1, -1\rangle \}$$

alte Basis aus 4 Zuständen:

$$\{ \underset{==}{|m_{S_1}, m_{S_2}\rangle} \} \hat{=} \left\{ \begin{matrix} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \\ \vec{\chi}_{\frac{1}{2}} \quad \vec{\chi}_{\frac{1}{2}} \end{matrix}, \begin{matrix} |\downarrow\downarrow\rangle \\ \vec{\chi}_{-\frac{1}{2}} \quad \vec{\chi}_{-\frac{1}{2}} \end{matrix}, \begin{matrix} |\uparrow\downarrow\rangle \\ \vec{\chi}_{\frac{1}{2}} \quad \vec{\chi}_{-\frac{1}{2}} \end{matrix}, \begin{matrix} |\downarrow\uparrow\rangle \\ \vec{\chi}_{-\frac{1}{2}} \quad \vec{\chi}_{\frac{1}{2}} \end{matrix} \right\}$$

Zusammen lag der Zustand über Clebsch-Gordan Koeffizienten:

$$\begin{aligned}
 S \begin{cases} |1, -1\rangle &= |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 & \downarrow \\
 |1, +1\rangle &= |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 & \uparrow \\
 |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_1) & \rightarrow \rightarrow \\
 a \begin{cases} |0, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\quad \quad \quad) & \downarrow \uparrow \end{cases}
 \end{cases}
 \end{aligned}$$


$S=1$: parallele Spins, $S=0$ antiparallele spins
symmetrisch antisymmetrisch

Clebsch-Gordan Koeffizienten ergibt sich aus:

$$|S, M_S\rangle = \sum_{m_S, m_{S1}} \langle m_S, m_{S1} | S, M_S \rangle |m_S, m_{S1}\rangle$$

wird mit Hilfe der Eigenwertprobleme

von $\vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2$ behandelt