d) mathematischer Einschub: Addition zweier Drehimpulse

2 Drehimpulse $\vec{J}_1, \vec{J}_2$ gegeben durch 2 Eigenschaften eines Teilchens (Spin, Bahn $\vec{\ell}$) oder 2 Teilchen (2 Elektronen)

Drehimpulseigenschaften $[J_{x_i}, J_{y_i}] = i\hbar J_{z_i}$ $(i = 1, 2)$

bestimmen die Eigenvektoren, Eigenwerte:

$$\vec{J}_i^2 |j_i, m_i\rangle = \hbar^2 j_i(j_i+1) |j_i, m_i\rangle$$

(j_i kann halb- oder ganzzahlig sein: Spin, Bahn) ,
$s = \frac{1}{2}$; $\ell = 0, 1, \dots$

$$J_{iz} |j_i, m_i\rangle = \hbar m_i |j_i, m_i\rangle$$

$$m_i = -j_i, \underbrace{-j_i + 1}_{\text{Einsabstand}} \dots, j_i$$

Bsp 2 Spins: $\underline{S}_{z1} |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle_1 = \pm\frac{\hbar}{2} |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle_1$ 2 Zustände: $m = \pm\frac{1}{2}$

für 2. Teilchen analog

Basis im Raum der 2 Spins (nicht wechselwirkend) sind die Produktzustände:

$$\left|\tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\right\rangle_1 \cdot \left|\tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\right\rangle_2$$

4 Stück

$$\begin{pmatrix} + & & + \\ + & \cdot & - \\ - & & + \\ - & & - \end{pmatrix}$$

es gibt Situationen wo diese Basis ungünstig ist,
das ist wenn kollektive Eigenschaften eine Rolle spielen
z.B. Spin-Bahn Kopplung, oder He-Atom: symmetrisch / antisymm. Spinfunktionen.

eine wesentliche Eigenschaft ist Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$$

oft vertauscht J mit $\underline{H}$ in atomaren Systemen,
daher günstig die Eigenzustände von J zu finden

<u>Bsp. 2 Spins</u>: $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$

wie findet man die Eigenzustände v. J: $|\,?\,\rangle$ ← Quantenzahlen ?

(i) $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \longrightarrow [J_x, J_y] = i\hbar J_z$ dieselbe Vertauschung!

durch verwenden v. $[J_{xi}, J_{yi}] = i\hbar J_{zi}$

daher gilt dasselbe Eigenwertproblem wie in QM I:

$$J^2 |J, M_J\rangle = \hbar^2 J(J+1) |J, M_J\rangle$$

$$J_z |J, M_J\rangle = \hbar M_J |J, M_J\rangle$$

Ziel: J, M_J zu bestimmen

zunächst Feststellung: welche weiteren Operatoren kann man auch und J^2, J_z simultan störungsfrei messen.

$$[J^2, J_1^2] = 0 = [J^2, J_2^2]$$

zeige durch Einsetzen

$$[J^2, J_{1z}] \neq 0 \neq [J^2, J_{2z}]$$

zusammenfassend:

alte Basis: $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$

in Basis: $|j_1, j_2, J, M_J\rangle = \sum_{m_1 m_2} \underbrace{a_{m_1 m_2}}_{\substack{\text{Clebsch-Gordan Koeffizienten} \\ \text{Wigner Koeffizienten}}} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$

Bsp 2 Spin: neuer Zustand $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, S = ?, M_S = ?\rangle$

Festlegung der M_J, J d.h. Bsp. S, M_S?

$$J_z |J, M_J\rangle = \hbar M_J |J, M_J\rangle$$

$$\left.\begin{aligned} J_{z1} |j_1, m_1\rangle &= \hbar m_1 |j_1, m_1\rangle \\ J_{z2} |j_2, m_2\rangle &= \hbar m_2 |j_2, m_2\rangle \end{aligned}\right\} \text{bekannt}$$

$$\underset{(J_{z1} + J_{z2})}{J_z} |J, M_J\rangle = \hbar \sum_{m_1 m_2} (m_1 + m_2)\, a_{m_1 m_2} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$$

$$\underbrace{= \hbar M_J \sum_{m_1 m_2} a_{m_1 m_2} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle}_{\text{beide Zeilen ansehen: (abziehen)}}$$

$$\hbar \sum_{m_1 m_2} \underbrace{(m_1 + m_2 - M_J)}\, a_{m_1 m_2} \underbrace{|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle} = 0$$

$= 0$ linear unabhängig

$$M_J = m_1 + m_2$$

$\sum_n \alpha_n |n\rangle = 0$

$\hookrightarrow \alpha_n = 0$

Menge d. M_J sind durch $m_1 + m_2$ bestimmt.

M_J kann halb und ganzzahlige Werte haben

Bsp. 2 Spins

$$M_S = \begin{cases} +\frac{1}{2}+\frac{1}{2} = +1 \\ +\frac{1}{2}-\frac{1}{2} = 0 \\ -\frac{1}{2}-\frac{1}{2} = -1 \end{cases}$$

$m_1 = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

$m_2 = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$

$$\{M_S\} = \{0, \pm 1\}$$

M_J bekannt! J fehlt

Problemstellung: j_1, j_2 = fest, M_J = klar, J = fehlt

M_J^{max}

$$M_J^{max} = J^{max} \quad : \quad M_J = -J, -J+1 \cdots J$$

$$M_J^{max} = m_1^{max} + m_2^{max} = \underbrace{j_1 + j_2}_{\text{bekannt u. fest}}$$

Bsp. 2 Spins: $j_1 = \frac{1}{2} = j_2 \rightarrow S^{max} = 1$

maximaler J ist j_1+j_2

$$\Downarrow \qquad J \leq j_1+j_2$$

kann man den kleinst mögl. J bestimmen (J^{min})

j_{min} aus der Bedingung, daß Zahl der Basiszustände in alter und neuer Basis gleich sein muß

$|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$

fest

Zahl neu = Zahl alt

$$\underbrace{\sum_{J=J_{min}}^{J_{max}=j_1+j_2}}_{\text{über alle } J\text{'s}} (2J+1) = (2j_1+1)\cdot(2j_2+1)$$

H-Atom:

$j_1 = l$:

$m_1 = m : -l, -l+1, \dots l$

$$|j_1, j_2, J, M_J\rangle$$

Bestimmungsgleichung f. J_{min}, dann ausführen (nachschlagen!)

$$(j_1+j_2-J_{min}+1)\,\frac{2J_{min}+1+2(j_1+j_2)+1}{2} = (2j_1+1)(2j_2+1)$$

könnte man auch J_{min} aufstellen:

Lösung ist $J_1 - J_2 = J_{min}$ für $J_1 > J_2$

$J_2 - J_1 = J_{min}$ f. $J_2 > J_1$

$\rightarrow \quad |J_1 - J_2| = J_{min}$

damit zusammenfassend!

Zustände: $|J_1, J_2, J, M_J\rangle$ sind EZ: J^2, J_z, J_1, J_2

$$J = \{ |J_1 - J_2|, \underbrace{|J_1 - J_2| + 1}, \ldots, J_1 + J_2 \}$$

$$M_J = -J, -J+1, \ldots, J$$

e) Ausführung der Theorie f. 2 Spins

2 Spins: (i) $|\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; J = S = 0, M_J = M_S = 0\rangle$

$J_1 = S_1 = \frac{1}{2}$

$J_2 = S_2 = \frac{1}{2}$

$\hat{=} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0\rangle \equiv |00\rangle$

(ii) $\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}; J=S=1, M_J=M_S=-1,0,+1\right\rangle$

$$\hat{=}\ \left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},1,-1\right\rangle,$$
$$\left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},1,0\right\rangle$$
$$\left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},1,+1\right\rangle$$

<u>Kurzschreibweise</u>

$\{|S,M\rangle\}$ ist ein Basissatz von V:

$$\Big\{\ \underbrace{|0,0\rangle}_{\text{Singulett-Zustand}};\ \underbrace{|1,-1\rangle;\ |1,0\rangle;\ |1,+1\rangle}_{\text{Triplett-Zustände}}\ \Big\}$$

Schreibweise alte Basis:

$$\left|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\right\rangle_1 \left|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\right\rangle_2 \equiv |\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$$

$$\left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle_1 \left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle_2 \equiv |\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2$$

$$\left|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\right\rangle_1 \left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle_2 \equiv |\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2$$

$$\left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle_1 \left|\tfrac{1}{2},+\tfrac{1}{2}\right\rangle_2 \equiv |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$$

$$|S, M_S\rangle = \sum_{ij=\uparrow,\downarrow} a_{ij}\, |i\rangle_1 \, |j\rangle_2$$

$$|1,-1\rangle = |\downarrow\rangle_1 \, |\downarrow\rangle_2 \qquad \begin{matrix} \downarrow & -\frac{1}{2} \\ \downarrow & -\frac{1}{2} \end{matrix}$$

$$|1,+1\rangle = |\uparrow\rangle_1 \, |\uparrow\rangle_2 \qquad \begin{matrix} \uparrow \\ \uparrow \end{matrix}$$

$$|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\downarrow\rangle_1 \, |\uparrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_2 \, |\uparrow\rangle_1\right) \qquad \rightarrow \rightarrow$$

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\downarrow\rangle_1 \, |\uparrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_2 \, |\uparrow\rangle_1\right) \qquad \begin{matrix} \downarrow \\ \uparrow \end{matrix}$$

ÜA

5.3. N-Teilchen-Zustand f. Fermionen im Ortsraum

N-Teilchen Zustand muß gegen Koordinatentausch

$$x_1 \leftrightarrow x_2 \quad ; \quad x_1 = (\vec r_1, \vec s_1)$$

antisymmetrisch sein

$$\Phi_N(x_1, x_2 \dots x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \underbrace{\begin{vmatrix} \varphi_{\alpha_1}(x_1) & \varphi_{\alpha_1}(x_2) & \dots & \varphi_{\alpha_1}(x_N) \\ \varphi_{\alpha_2}(x_1) & \varphi_{\alpha_2}(x_2) & \dots & \\ \varphi_{\alpha_3}(x_1) & \dots & & \dots \\ \dots & & \dots & \\ \varphi_{\alpha_N}(x_1) & \dots & & \varphi_{\alpha_N}(x_N) \end{vmatrix}}_{\text{Slaterdeterminante, stellt Antisymmetrie sicher}}$$

Normierung

α_1 = QZ f. Ort und Spin

$= n_1, m_1$

n_1: Ort, m_1: Spin

($\varphi_{\alpha_i}(x_i)$ ≙ Spin-Bahn-Orbitale)

Grenzfall f. 2 Teilchen zuvor ist enthalten