N Bosonen : symmetrische WF

N Fermionen : antisymmetrische WF
bzgl. Teilchenvertauschung

Fermionen: Slater-Determinanten

1.6 Anwendungen: N=2 Elektronen. Singletts / Tripletts

Einteilchenzustände $|\nu_1\rangle$ $|\nu_2\rangle$

$$\langle \xi_1 \xi_2 | \nu_1 \nu_2 \rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_{\nu_1}(\xi_1) & \psi_{\nu_1}(\xi_2) \\ \psi_{\nu_2}(\xi_1) & \psi_{\nu_2}(\xi_2) \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_{\nu_1}(\xi_1)\psi_{\nu_2}(\xi_2) - \psi_{\nu_2}(\xi_1)\psi_{\nu_1}(\xi_2) \right\}$$

$$\xi_1 = (\underline{x}_1, \sigma_1)$$

$$\psi_{\nu_1}(\xi_1) = \psi_{\nu_1}(x_1)|\sigma_1\rangle$$

Insgesamt vier Einstellungsmöglichkeiten für den Spin: $\sigma_1 = \uparrow, \downarrow$; $\sigma_2 = \uparrow, \downarrow$, d.h.

$|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\downarrow\rangle$ als Basis im Spin-Raum $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$

Aus 4 Basis-Slaterdeterminanten nun neue Linearkombinationen:

$$|\psi_S\rangle \leftrightarrow \psi^+_{\nu_1\nu_2}(x_1, x_2)|S\rangle$$

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

$$\psi^+_{\nu_1\nu_2}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_{\nu_1}(x_1)\psi_{\nu_2}(x_2) + \psi_{\nu_1}(x_2)\psi_{\nu_2}(x_1)\right]$$

$$|\Psi_{T_{-1}}\rangle \Leftrightarrow \Psi^-_{\nu_1\nu_2}(x_1,x_2)|T_{-1}\rangle$$

$$|\Psi_{T_0}\rangle \Leftrightarrow \Psi^-_{\nu_1\nu_2}(x_1,x_2)|T_0\rangle$$

$$|\Psi_{T_1}\rangle \Leftrightarrow \Psi^-_{\nu_1\nu_2}(x_1,x_2)|T_1\rangle$$

$$|T_1\rangle \equiv |\uparrow\uparrow\rangle \qquad |T_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right)$$

$$|T_{-1}\rangle \equiv |\downarrow\downarrow\rangle$$

$|S\rangle$: Singletts, Gesamtspin $S=0$

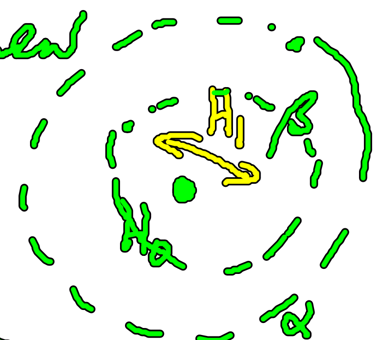
$|T_i\rangle$: Tripletts, Gesamtspin $S=1$

Tripletts: symmetrisch. Singlett: antisymmetrisch

$$\Psi^-_{\nu_1\nu_2}(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_{\nu_1}(x_1)\psi_{\nu_2}(x_2) - \psi_{\nu_2}(x_1)\psi_{\nu_1}(x_2)\right\}$$

antisymmetrische Bahn-Wellenfunktion.

b) Störungstheorie für $N=2$ Elektronen (He-Atom)



$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

- Basis $|\Psi^+_{\alpha\beta}\rangle|S\rangle, |\Psi^-_{\alpha\beta}\rangle|T_\sigma\rangle$, $\sigma = 0, \pm 1$

von Zuständen. Hier $\alpha \neq \beta$

z.B. $\alpha = n_1 l_1 m_1 = 321$

$\beta = n_2 l_2 m_1$ beziehen sich auf $\hat{H}_0$.

$$\hat{H}_0|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle,$$
$$\hat{H}_0|\beta\rangle = \varepsilon_\beta|\beta\rangle.$$

- 1. Ordnung Störungstheorie: eventuell auch Entartung.

$$\langle +|H_1|+\rangle \equiv \langle \Psi^+_{\alpha\beta}|H_1|\Psi^+_{\alpha\beta}\rangle$$
$$\langle -|H_1|-\rangle \equiv \langle \Psi^-_{\alpha\beta}|H_1|\Psi^-_{\alpha\beta}\rangle$$

hängen (indirekt) vom (Gesamt-Spin) ab,

d.h. $+ \widehat{=} |S\rangle$, also $S=0$

$- \widehat{=} |T_\sigma\rangle$, also $S=1$.

$$H_1 = U(|x_1-x_2|) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{|x_1-x_2|}$$

hängt nicht vom Spin ab.

Aufgabe

$$\langle \pm|H_1|\pm\rangle = A_{\alpha\beta} \pm J_{\alpha\beta}$$

$$A_{\alpha\beta} \equiv \int dx_1 dx_2\, |\Psi_\alpha(x_1)|^2\, U(|x_1-x_2|)\, |\Psi_\beta(x_2)|^2$$

„direkter Term"

$$J_{\alpha\beta} \equiv \int dx_1 dx_2\, \Psi_\alpha^*(x_2)\Psi_\beta^*(x_1)\, U(|x_1-x_2|)\cdot \Psi_\alpha(x_1)\Psi_\beta(x_2)$$

„Austauschterm" (Austauschintegral)

Spezialfall: $\alpha = \beta$: dann $|S\rangle$ als Spin-Anteil

$$\Psi^{+}_{\alpha\alpha}(x_1, x_2) = \Psi_\alpha(x_1)\Psi_\alpha(x_2)$$

und $\langle + | H_1 | + \rangle = A_{\alpha\alpha}$.

Beispiel: Parahelium. Grundzustand 0. Ordnung in H_1 ist $|\Psi^{+}_{\alpha\alpha}\rangle |S\rangle$

mit Wasserstoff-WF, $\alpha = n\ell m = 100$,

$$E^{(0)}_{\alpha\alpha} = -8 \, E_{Rydberg}.$$

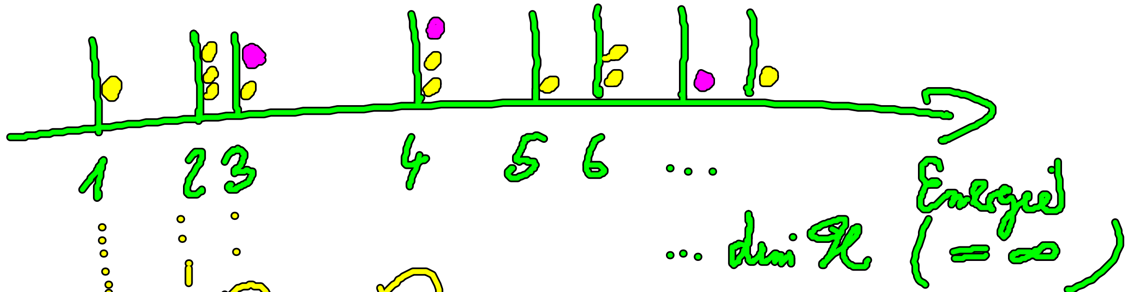
Korrektur 1. Ordnung mit $\Delta E^{(1)}_{\alpha\alpha} = A_{\alpha\alpha} = \frac{5}{2} E_{Rydberg}$

$$\rightarrow \quad E^{(1)}_{100,100} = -\frac{11}{2} E_{Rydberg} \approx -75\,eV.$$

gemessen wird $-79\,eV$

$$A_{\alpha\alpha} = \int dx_1\, dx_2\, |\Psi_\alpha(x_1)|^2 |\Psi_\alpha(x_2)|^2 \frac{1}{|x_1 - x_2|}.$$

Kapitel 2: Zweite Quantisierung



$|\boxed{1}\,\boxed{3}\,\boxed{1}\;\;\boxed{2}\;1\;2\;0\;1\ldots\rangle_+$ Bosonen

$|0\,0\,1\;\;1\;\;0\,0\,1\,0\rangle_-$ Fermionen

2.1 Notation

$\mathcal{H}$ Einteilchen-Hilbertraum

Basis $\{|\nu\rangle\}$; $\nu = 1,2,3\ldots \dim\mathcal{H}$

N Fermionen

$$|\nu_1\nu_2\ldots\nu_N\rangle_A \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{p\in S_N}\mathrm{sgn}\,p\,\hat{\Pi}_p\,\psi_{\nu_1}(\xi_1)\ldots\psi_{\nu_N}(\xi_N)$$

1. Quantisierung

$$|n_1 n_2 \ldots n_{\dim\mathcal{H}}\rangle_-^N$$

$n_1 = \#$ (Anzahl) aller ν_i mit $\nu_i = 1$

$n_2 = \#$ aller ν_i mit $\nu_i = 2$

wobei $n_i = 0$ oder 1 (Pauli)

$$\sum_{i=1}^{\dim\mathcal{H}} n_i = N$$

Beispiel: $\dim\mathcal{H} = 10$, $N = 4$

$$|3\,5\,6\,9\rangle_A = |0010110010\rangle_-^4$$

$\underbrace{\nu_1 \nu_2 \nu_3 \nu_4}_{\text{1. Quantisierung}}$ $\underbrace{n_1 \quad n_3 \quad\quad\quad\rangle}_{\text{2. Quantisierung}}$

Bosonen:

$$|\underbrace{\nu_1 \nu_1 \ldots \nu_1}_{N_1} \ldots \underbrace{\nu_r \nu_r \ldots \nu_r}_{N_r}\rangle_S$$

$$\Longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{N!}} \frac{1}{\sqrt{N_1! \cdot \ldots \cdot N_r!}} \sum_{p \in S_N} \hat{\Pi}_p\, \psi_{\nu_1}(\xi_1) \cdot \ldots \cdot \psi_{\nu_r}(\xi_N)$$

1. Quantisierung

$$|n_1 n_2 n_3 \ldots n_{\dim \mathcal{H}}\rangle_+^N, \qquad 0 \leq n_i \leq N; \quad \sum n_i = N$$

Beispiel: $\dim \mathcal{H} = 10$, $N = 7$

1. Qu. $|3355589\rangle_S \Longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{7!}} \frac{1}{\sqrt{2!\,3!\,1!\,1!}} \sum_p \Pi_p \ldots$

2. Qu. $|0020300110\rangle_+^7$

2.2. Basiszustände. Fermionische / bosonische

Hilberträume. Fockraum

Fermionische Basiszustände $|n_1, n_2, \dots\rangle^N_-$ für Hilbertraum $\mathcal{H}^{(-)}_N$ aller anti-symmetrischen N-Teilchenzustände

Bosonische Basiszustände entsprechend

- Orthonormalität: ${}^N_\sigma\langle n_1 n_2 \dots | n_1' n_2' \dots\rangle^{N'}_{\sigma'} =$

$$= \delta_{\sigma\sigma'}\, \delta_{NN'}\, \delta_{n_1, n_1'}\, \delta_{n_2, n_2'} \dots ; \quad \sigma = \pm$$

- Vollständigkeit: $\sum_{n_1 n_2 \dots} |n_1 n_2 \dots\rangle^N_\pm {}^N_\pm\langle n_1 n_2 \dots| = \hat{1}^{(N)}_\pm$

wegen der Vollständigkeit der Einteilchenzustände.

<u>Definition</u>: Der fermionische (bosonische) Fockraum, der zu einer gegebenen Folge $\mathcal{H}^-_N$ $(\mathcal{H}^+_N)$ mit $N = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$ gehört, ist die direkte Summe

$$\mathcal{H}^\pm_{\text{Fock}} \equiv \mathcal{H}^{(\pm)}_0 \oplus \mathcal{H}^{(\pm)}_1 \oplus \mathcal{H}^{(\pm)}_2 \oplus \dots$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N^{(\pm)}$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \Big(\underbrace{\mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}}_{N\text{-mal}}\Big)^{(\pm)}$$

mit $\mathcal{H}_0^{(\pm)} = \mathrm{span}\big(|vac\rangle_\pm\big)$

$$\uparrow = |00000\dots\rangle_\pm$$

„Vakuumzustand".

- Nützlich zur Beschreibung von Vorgängen, bei denen sich die Teilchenzahl ändert.