

11.01.08

11.01.2008

1 Teilchen - Operatoren

z.B. Potential $V(x_1) = \frac{1}{2} m x_1^2 \omega^2$
kin. Energie $\frac{p_1^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}$

Sq: N-Teilchen-Operatoren in $\mathcal{L}_N^{(\pm)}$
haben die Form

$$\| \hat{O}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \sum_{i=1}^N A(\xi_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{B}(\xi_i, \xi_j) \quad]$$

e.B. $B(\mathbf{p}_3, \mathbf{p}_5) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_5|}$
 für Coulomb-WW.

im Prinzip auch 3-Teilchen-Operatoren

$$\hat{C}(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j, \mathbf{p}_k) \text{ etc}$$

(Molekülphysik, Kernphysik)

Satz: N -Teilchen-Operatoren in $\mathcal{H}_N^{(\pm)}$
 können einfach auf den
 gesamten (bosonischen oder fermionischen)
 Fockraum $\mathcal{H}_{\text{Fock}}^{(\pm)}$ erweitert werden
 durch die Einführung von

Erzeugern a_λ^+

Vernichtern a_λ

$\{|\lambda\rangle\}$ 1-Teilchen-Basis mit α -Zahlen
 λ

Hierbei definiert man

Bosonen

$$a_\lambda |n_1 n_2 \dots n_\lambda \dots\rangle_+ \equiv \sqrt{n_\lambda} |n_1 n_2 \dots n_\lambda - 1 \dots\rangle_+$$

$$a_\lambda^+ |n_1 n_2 \dots n_\lambda \dots\rangle_+ \equiv \sqrt{n_\lambda + 1} |n_1 n_2 \dots n_\lambda + 1 \dots\rangle_+$$

UA \Rightarrow (Kommutator), Vertauschungsrelationen

$$[a_\lambda, a_\mu^\dagger] = \delta_{\lambda\mu}$$

$$[a_\lambda, a_\mu] = [a_\lambda^\dagger, a_\mu^\dagger] = 0$$

Fermionen:

$$a_\lambda |n_1 n_2 \dots n_\lambda \dots\rangle = \delta_{\lambda,1} |n_1 n_2 \dots n_{\lambda-1} \dots\rangle \cdot (-1)^{\sum_{i=1}^{\lambda-1} n_i}$$

\uparrow jeweils 0 oder 1 \swarrow 0 falls $n_\lambda = 0$

$$a_\lambda^\dagger |n_1 n_2 \dots n_\lambda \dots\rangle = \delta_{\lambda,0} |n_1 n_2 \dots n_{\lambda+1} \dots\rangle \cdot (-1)^{\sum_{i=1}^{\lambda-1} n_i}$$

\swarrow 0 falls $n_\lambda = 1$ \searrow 1

Anti-Vertauschungsrelationen mit

Anti-Kommutatoren $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$

manchmal $\equiv [A, B]_+$

$$\left. \begin{aligned} \{a_\lambda, a_\mu^\dagger\} &= \delta_{\lambda\mu} \\ \{a_\lambda, a_\mu\} &= \{a_\lambda^\dagger, a_\mu^\dagger\} = 0 \end{aligned} \right\} \text{UA}$$

$$\uparrow a_\lambda a_\mu = -a_\mu a_\lambda$$

Operatoren

1. Quantisierung

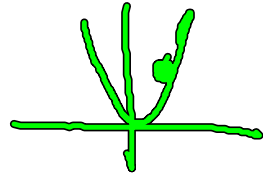
$$\sum_{i=1}^N \hat{A}(\mathbf{p}_i)$$

z.B. $\hat{A} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

2. Quantisierung

$$\sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | \hat{A} | \mu \rangle a_{\lambda}^{\dagger} a_{\mu}$$

"Sandwich"



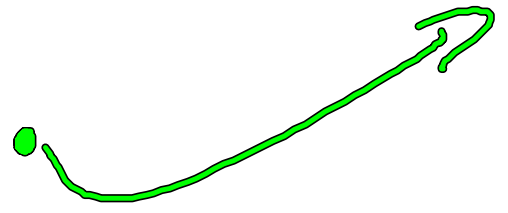
$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \hat{B}(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j)$$

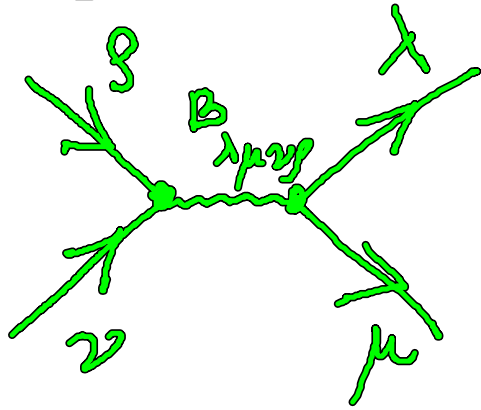
$$\frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu, \nu, \rho} \langle \lambda \mu | \hat{B} | \nu \rho \rangle a_{\lambda}^{\dagger} a_{\mu}^{\dagger} a_{\nu} a_{\rho}$$

$$\langle \Psi_{\lambda}(\xi_1) | \langle \Psi_{\mu}(\xi_2) | B(\xi_1, \xi_2) | \Psi_{\nu}(\xi_2) \rangle | \Psi_{\rho}(\xi_1) \rangle$$

ξ_1 fest, Skalarprodukt
über ξ_2

SCHERZ
NOLTIN G





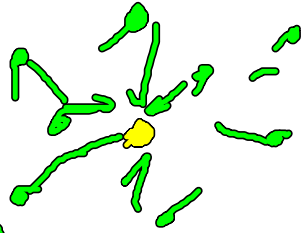
"Feynman
-Diagramm"

Hartree-Fock-Methode

Die Hartree-Fock-Beschreibungen, Atome, Periodensystem

Idee: wechselwirkendes Problem

→ effektives Potential, das auf jedes Teilchen j wirkt und das durch alle anderen Teilchen $i \neq j$ erzeugt wird



z.B. für Coulomb-Wirkung

$$W(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$V_H(r_i) = \sum_{j=1}^N \int d\mathbf{r}_j \frac{|\Psi_{2j}(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} \cdot \frac{-e}{4\pi\epsilon_0}$$

$j \neq i$
 Potential, das Teilchen i „sieht“

\Rightarrow Potentielle Energie ist $-e V_H(\mathbf{r}_i)$

\Rightarrow Gesamts-Energie für Teilchen i ist

$$H_{\text{Hartree}}^{(i)} = H_0^{(i)} + V_H(\mathbf{r}_i)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{\text{außen}}(\mathbf{r}_i)$$

$$+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \int d\mathbf{r}_j \frac{|\Psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|}$$

\Rightarrow Sgl.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{\text{außen}}(\mathbf{r}_i) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \int d\mathbf{r}_j \frac{|\Psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_j)|^2}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|} \right] \Psi_{\nu_i}(\mathbf{r}_i) = \epsilon_{\nu_i} \Psi_{\nu_i}(\mathbf{r}_i)$$

Lösung: iterativ

Gesamte Wellenfunktion in dieser Hartree-Näherung ist das Produkt

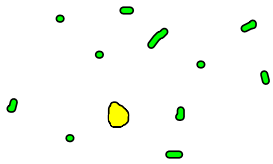
$$\Psi_{\text{Hartree}}(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \dots, \mathbf{r}_N, \sigma_N) = \Psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \dots \Psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_N, \sigma_N)$$

Zuletzt Mittelwert

$$V_{\text{Hartree}}(\underline{r}) \rightarrow \langle V_{\text{Hartree}} \rangle(r)$$
$$\equiv \int \frac{d\Omega}{4\pi} V_{\text{Hartree}}(r)$$

Sogar noch einfacher. in Atomen. - Kernpotential
- V_{Hartree}

$$\underbrace{V_{\text{Hartree}}(\underline{r})}_{\text{Kernpotential}} + \underbrace{\frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r}}_{V_{\text{Hartree}}} \rightarrow V_{\text{eff}}(r) \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z(r)}{r}$$



z.B.

$$Z(r \rightarrow 0) = Z$$

$$Z(r \rightarrow \infty) = 1$$

Periodensystem:

Zuletzt Slater-Determinanten aus den effektiven WF bilden.

\Rightarrow Grundzustände der Atome mit $N \approx Z$ Elektronen

N Spin-Orbitale $|2_i\rangle = |n_i, l_i, m_i, \sigma_i\rangle$

\Rightarrow Atome daraus aufbauen

H	1s	$^2 S_{1/2}$
He	$(1s)^2$	$^1 S_0$
Li	(He) (2s)	$^2 S_{1/2}$
Be	(He) $(2s)^2$	$^1 S_0$
B	(He) $(2s)^2 (2p)$	$^2 P_{1/2}$
C	(He) $(2s)^2 (2p)^2$	$^3 P_0$

Spektroskopische Notation $2S+1$
 \downarrow
 J

S Gesamt spin
L Gesamt-Bahnimpuls
J Gesamt-Impuls

Hund'sche Regeln

- 1) Zustand mit größter Gesamtspin S liegt energetisch am tiefsten:
Spin-symmetrische WF
hat antisymmetrischen
Bahn-WF
- 2) Für gegebenes S liegt der Zustand mit maximalem L am tiefsten:
- 3) L, S gegeben:
 - i) nichts mehr als halbgefüllte Schale: $J = |L - S|$
 - ii) mehr als halbgefüllte Schale:
 $J = L + S$
wegen Spin-Bahn WK