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

bestimme 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),
$s = \frac{1}{2}$; $\ell = 0, 1, \ldots$

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

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

<u>Bsp 2 Spins</u>: $S_{z1} \, |\tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\rangle_1 = \pm \frac{\hbar}{2} \, |\tfrac{1}{2}, \pm\tfrac{1}{2}\rangle_1$ 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 Situation 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 Verwendung 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: $|j_1, j_2, J, M_J\rangle = \sum_{m_1 m_2} \underbrace{a_{m_1 m_2}}\, |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$

Clebsch-Gordan Koeffizienten

Wigner Koeffizienten

<u>Bsp 2 Spin</u>: neue Zustände $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, S = ?, M_S = ?\rangle$

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

$$\underline{J}_z |J, M_J\rangle = \hbar M_J |J, M_J\rangle$$

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

$$\underset{\substack{\shortparallel \\ (\underline{J}_{z1} + \underline{J}_{z2})}}{\underline{J}_z} |\underline{\underline{J, M_J}}\rangle = \hbar \sum_{m_1 m_2} (m_1 + m_2)\, a_{m_1 m_2} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$$

$$= \hbar M_J \sum_{m_1 m_2} a_{m_1 m_2} \underline{|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle}$$

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 <u>halb</u> und <u>ganzzahlige</u> Werte haben

<u>Bsp. 2 Spins</u>

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

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

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

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

M_J bestimmt! J fehlt

Problemstellung: $j_1, j_2 = \text{fest}$, $M_J = \text{klar}$, $J = \text{fehlt}$

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

M_J^{max}

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

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

maximales J ist $j_1 + j_2$

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

kann man das 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

$$\sum_{J=J_{min}}^{J_{max}=j_1+j_2} \underbrace{(2J+1)}_{|j_1, j_2, J, M_J\rangle} = (2j_1+1)\cdot(2j_2+1)$$

über alle J's

H-Atom:

$j_1 = l$:

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

Bestimmungsgleichung f. J_{min}, Summe 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 nach J_{min} umstellen:

Lösung ist $j_1 - j_2 = J_{min}$ für $j_1 > j_2$

$j_2 - j_1 = J_{min}$ f. $j_2 > j_1$

$\rightarrow \quad |j_1 - j_2| = J_{min}$

<u>damit zusammenfassend!</u>

Zustände: $|j_1, j_2, J, M_J\rangle$ sind EZ: J^2, J_z, j_1, j_2

$$J = \{ |j_1 - j_2|, \underbrace{|j_1 - j_2| + 1}, \dots, j_1 + j_2 \}$$

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

e) Ausführung der Theorie f. 2 Spins

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

$j_1 = S_1 = \frac{1}{2}$

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

$j_2 = S_2 = \frac{1}{2}$

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

$$\hat{=} \; |\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}, 1, -1\rangle,$$

$$|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}, 1, 0\rangle$$

$$|\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}, 1, +1\rangle$$

Kurzschreibweise

$\{|S, M\rangle\}$ ist neuer Basissatz in V:

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

Schreibweise alte Basis:

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

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

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

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

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

$$|1, -1\rangle = |\downarrow\rangle_1 \, |\downarrow\rangle_2 \qquad \downarrow -\tfrac{1}{2} \quad \downarrow -\tfrac{1}{2}$$

$$|1, +1\rangle = |\uparrow\rangle_1 \, |\uparrow\rangle_2 \qquad \uparrow \quad \uparrow$$

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

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

ÜA

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

N-Teilchen Zustand muß gegen Koordinatenvertauschung

$$x_1 \leftrightarrow x_2 \quad ; \quad x_1 = (\vec{r}_1, s_1)$$

antisymmetrisch sein

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

Normierg.

α_1 = QZ f. Ort und Spin

$= n_1, m_1$

Ort, Spin

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

Grenzfall f. 2 Teilchen zustand ist enthalten