9.1.2008

N Bosonen : symmetrische WF

N Fermionen : antisymmetrische WF
bzgl. Teilchenvertauschung

Fermionen: Slater-Determinanten

1.6 Anwendungen: N=2 Elektronen. Singletts / Tripletts

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

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

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

$$\Psi_{\nu_1}(\xi_1) = \psi_{\nu_1}(x_1)|\sigma_1\rangle \qquad \xi_1 \equiv (\underline{x}_1, \sigma_1)$$

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 $S = 0$

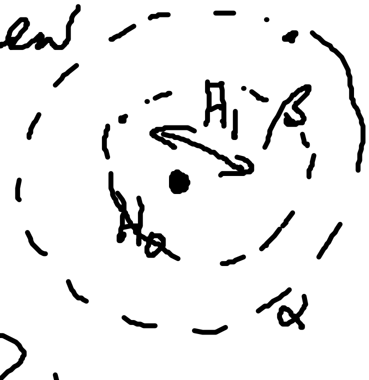
$|T_i\rangle$: Tripletts, Gesamtspin $S = \underline{1}$

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

vier Zustände. 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. $+ \mathrel{\hat{=}} |S\rangle$, also $S = 0$

$- \mathrel{\hat{=}} |T_0\rangle$, 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

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

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, $\alpha = nlm = 100$,

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

Korrektur 1. Ordnung mit $\Delta E^{(1)}_{\alpha\alpha} = \underline{A_{\alpha\alpha}} =$

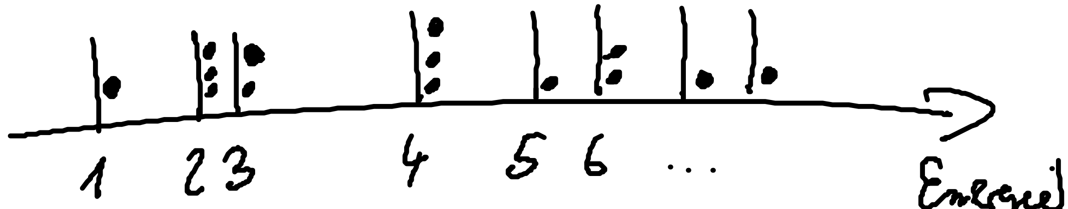
$$= \frac{5}{2} E_{Rydberg}$$

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

gemessen wird -79 eV

$$A_{\alpha\alpha} = \int d\underline{x}_1\, d\underline{x}_2\, |\Psi_\alpha(x_1)|^2 |\Psi_\alpha(x_2)|^2 \frac{1}{|x_1 - x_2|}.$$

$\boxed{\text{Kapitel 2: Zweite Quantisierung}}$



... $\dim \mathcal{H}$ $(=\infty)$

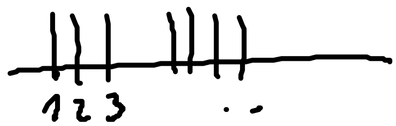
$|1\ 3\ 1\ \ 2\ 1\ 2\ 0\ 1 \ldots \rangle_+$ Bosonen

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

2.1 Notation

$\mathcal{H}$ Einteilchen-Hilbertraum

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



$|1\rangle$

N Fermionen

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

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

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

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

Bosonen:

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

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

1. Quantisierung

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

Beispiel: $\dim\mathcal{H} = 10$

$N = 7$

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

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

2.2. Basiszustände. Fermionische/bosonische

Hilberträume. Fockraum

Fermionische Basiszustände $|n_1, n_2, \ldots\rangle_-^N$
für Hilbertraum $\mathcal{H}_N^{(-)}$ aller anti-symmetrischen
N-Teilchenzustände.
Bosonische Basiszustände entsprechend

- Orthonormalität: ${}_{\sigma}^{N}\langle n_1 n_2 \ldots | n_1' n_2' \ldots \rangle_{\sigma'}^{N'} =$

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

- Vollständigkeit: $\sum\limits_{n_1 n_2 \ldots} |n_1 n_2 \ldots\rangle_{\pm}^{N}\, {}_{\pm}^{N}\langle n_1 n_2 \ldots | = \mathbb{1}_{\pm}^{(N)}$

wegen der Vollständigkeit der Einteilchenzustände.

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

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

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

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

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

$$= |100000\ldots\rangle_\pm$$

„Vakuumzustand".

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