3.4. Vielteilchenzustände Schrödingerfeld

Ziel: Ort / Spin – Darstellg. der Wellenfunktionen

suchen $\phi(x_1, x_2 \dots x_N) = \langle x_1 \cdots x_i \cdots x_N | n_1 \cdots n_\lambda \cdots n_{N_0} \rangle$

↑ Modenzahl

$x_1 = \vec{r}_1, \vec{s}_1 \; (m_{s_1} = \pm \frac{1}{2}) \;\hat{=}\;$ Notation

Teilchen am Ort $\vec{r}_1$ im Spinzustand m_{s_1}

N: Anzahl d. Teilchen

n_λ Teilchen in Mode λ

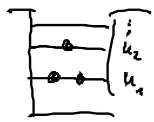
a) $$|n_1, n_2 \cdots n_\lambda \cdots \rangle = \prod_\lambda \frac{\left(a_\lambda^+\right)^{n_\lambda}}{\sqrt{n_\lambda!}} |0\rangle$$

Vakuumzustand $|0,0,0,0 \cdots \rangle$

Produktzustand weil nicht wechselwirkend

Normierung

$$\sum_\lambda n_\lambda = N \;\hat{=}\; \text{Gesamtteilchenzahl } N$$



b) wissen: $a_\lambda^+(t) = \int dx \, \vec{\varphi}_\lambda(x) \cdot \vec{\Psi}^+(x,t)$: $x = \vec{r}, \vec{s}$; $\int dx = \int d^3r \sum_s$

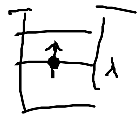
wähle $\vec{\varphi}_\lambda(x)$ als Eigenfktion d. Ortsoperators wähle:

$$\underline{\underline{\vec{\varphi}_\lambda(x)}} \rightarrow \underline{\underline{\varphi_i}}(\vec{r}) \vec{\chi}_{m_{s_i}} = \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \vec{\chi}_{m_{s_i}}$$

$$|x_1 \cdots x_i \cdots x_N \rangle = \prod_i \frac{\left(\Psi^+(x_i, t)\right)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}} |0\rangle \text{ mit: } \Psi^+ = \Psi^+(\vec{r}_i, m_{s_i}, t)$$

3.4.1. Einteilchenwellenfunktion (Fermion + Boson identisch)

Suche: $\langle x_1 | 0, 0, 0 \cdots \underset{\uparrow \atop \lambda}{1}, \cdots \rangle$



λ $\quad \varphi_{n_\lambda}(\vec r)\, \vec\chi_{\uparrow}$ ← Ort ← Spin

Frage: was ist Ortswellenfunktion f. Teilchen bei $\vec r_1$ mit Spin m_{s_1}

a) Einmodenzustand mit 1 Teilchen

$$|0, 0 \cdots 1\rangle = a_\lambda^+ |0\rangle$$

B/F

Normierung: $\langle 0 | a_\lambda a_\lambda^+ | 0\rangle = \langle 0 | 1 \pm a_\lambda^+ \underbrace{a_\lambda | 0\rangle}_{0} = 1$

Orb/Spin wellenfkt: $\phi(x_1) = \langle x_1 | 0 \cdots 1 \cdots \rangle$

$$= \langle 0 | \psi(x_1)\, a_\lambda^+ | 0\rangle$$

$$= \langle 0 | \sum_{\lambda'} \varphi_{\lambda'}(x_1)\, a_{\lambda'}\, a_\lambda^+ | 0\rangle$$ Normalordnung herstellen!

$$= \sum_{\lambda'} \langle 0 | \varphi_{\lambda'}(x_1) \left(\delta_{\lambda\lambda'} \pm a_\lambda^+ \underbrace{a_{\lambda'}) | 0\rangle}_{0} = \varphi_\lambda(x_1)$$

$\varphi_\lambda(x_1)$ = Teilchen im Zustand $\lambda = n, m_s$ mit Koordinate x_1:

Ort $\quad$ Spin

$\| \quad \varphi_{n_1}(\vec r_1)\, \vec\chi_{m_{s_1}} \quad \hat{=}$ Eigenzustand von $H_0^{(1)}$

b) Vielmodenzustand:

$$|1\,\text{Anregg.}\rangle \equiv |1\rangle = \sum_\lambda c_\lambda a_\lambda^+ |0\rangle$$ $\hat{=}$ Überlagerung von Einteilchenzuständen

$$\sum_\lambda |c_\lambda|^2 = 1 \quad \text{(Wahrscheinlichkeit)}$$

$$\phi(x_1) = \sum_\lambda c_\lambda \, \varphi_\lambda(x_1) \quad \text{Überlagerg v. Eigenzuständen von } H_0^{(1)}$$

3.4.2. Zweiteilchenwellenfunktion f. Fermionen

$$|\ldots 1 \ldots 1 \ldots\rangle = a^+_{\lambda_1} a^+_{\lambda_2} |0\rangle \qquad \lambda_1 \neq \lambda_2 \text{, sonst } 0$$

Normierung:

$$\langle 0| a_{\lambda_2} a_{\lambda_1} a^+_{\lambda_1} a^+_{\lambda_2} |0\rangle = \langle 0| a_{\lambda_2} \underbrace{(1 - a^+_{\lambda_1} a_{\lambda_1})}_{} a^+_{\lambda_2} |0\rangle$$

Normal-ordnung

$$\langle 0| (1 - a^+_{\lambda_2} a_{\lambda_2}) - a_{\lambda_2} a^+_{\lambda_1} (\delta_{\lambda_1 \lambda_2} - a^+_{\lambda_2} a_{\lambda_1}) |0\rangle$$

$$0$$

$$= \langle 0| 1 - a_{\lambda_1} a^+_{\lambda_1} \underbrace{\delta_{\lambda_1 \lambda_2}}_{\lambda_1 \neq \lambda_2} |0\rangle = \underline{\underline{1}}$$

Orts-/Spindarstellg.:

$$|x_1, x_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi^+(x_1) \, \psi^+(x_2) \, |0\rangle$$

gesucht: $\phi(x_1, x_2) = \langle x_1\, x_2 | \cdots 1 \cdots 1 \cdots \rangle$

$$= \langle x_1\, x_2 | a^+_{\lambda_1} a^+_{\lambda_2} | 0 \rangle$$

Übungsaufgabe

$$\phi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(\underbrace{\varphi_{\lambda_1}(x_1)\, \varphi_{\lambda_2}(x_2)}_{\text{Produktzustand}} - \underbrace{\varphi_{\lambda_2}(x_1)\, \varphi_{\lambda_1}(x_2)}_{\text{stellt Ununterscheidbarkeit der Teilchen sicher}} \Big)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_{\lambda_1}(x_1) & \varphi_{\lambda_1}(x_2) \\ \varphi_{\lambda_2}(x_1) & \varphi_{\lambda_2}(x_2) \end{vmatrix}$$

Spin-Statistik Theorem ist in 2. Quantisierung enthalten.

in der Formulierung $x = (\vec{r}, m_s)$ wird gleichzeitig vertauscht

Erinnerung: Notation: $\varphi_\lambda(x) = \varphi_n(\vec{r}) \cdot \vec{\chi}_{m_s}$ $\quad \lambda : (n, m_s)$

Setze: $m_{s_i} \equiv s_i$

$$\vec{\phi}(x_1 x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(\varphi_{n_1}(\vec{r}_1) \vec{\chi}_{s_1}(s_1)\, \varphi_{n_2}(\vec{r}_2) \vec{\chi}_{s_2}(s_2)$$

$$- \varphi_{n_2}(\vec{r}_1) \vec{\chi}_{s_2}(s_1)\, \varphi_{n_1}(\vec{r}_2) \vec{\chi}_{s_1}(s_2) \Big)$$

Fermion: $\phi(x_1, x_2) = -\phi(x_2, x_1)$

$$|\phi|^2 = \text{unverändert}$$

3.4.3. Alternative Formulierung f. Zweiteilchen WF (Fermionen)

oft ist es nötig Gesamtspin an der Wellenfunktion zu sehen:

Versuch: ϕ = Bahnanteil und Spinanteil

unter Berücksichtigung der Antisymmetrie:

ein Anteil muß antisymm. sein, der andere symmetrisch

↓ Konstruktion v. symmetrisch / antisymmetrisch Spinfunktionen:

$$\vec{\chi}_{\pm}(s_1, s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\vec{\chi}_{s_1}(s_1)\, \vec{\chi}_{s_2}(s_2) \overset{\text{symmetrisch}}{\underset{\text{antisymm.}}{\pm}} \vec{\chi}_{s_2}(s_1)\, \vec{\chi}_{s_1}(s_2) \right)$$

analog Bahnanteil:

$$\varphi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_{k_1}(\vec{r}_1)\, \varphi_{k_2}(\vec{r}_2) \pm \varphi_{k_2}(\vec{r}_1)\, \varphi_{k_1}(\vec{r}_2) \right)$$

$\Longrightarrow$ Gesamtwellenfkt: $\phi_{\pm} = \varphi_{+} \vec{\chi}_{-}$, $\phi_{\mp} = \varphi_{-} \vec{\chi}_{+}$

Spezialfall gleicher Quantenzahlen:

$$\underbrace{\vec{\chi}_s(s_1)\,\vec{\chi}_s(s_2)}_{\text{symmetrisch}}\ \underbrace{\varphi_-(\vec{r}_1,\vec{r}_2)}_{\text{antisymm.}}\ ,\ \text{oder:}$$

$$\underbrace{\varphi_u(\vec{r}_1)\,\varphi_u(\vec{r}_2)}_{\text{symm.}}\ \underbrace{\vec{\chi}_-(s_1,s_2)}_{\text{antisymm.}}$$

2 Dinge „wären" zu zeigen:

a) Die Funktion $\varphi_+\vec{\chi}_-$, $\varphi_-\vec{\chi}_+$, $\vec{\chi}\vec{\chi}\varphi_-$, $\varphi\varphi\vec{\chi}_-$ können aus $\phi(x_1,x_2)$ erzeugt werden und beinhalten den ganzen Raum

b) Was bedeuten $\varphi_+\vec{\chi}_-$ .... physikalisch?

zu a) $\vec{\chi}_s(s_1)\vec{\chi}_s(s_2)\varphi_-$ und $\varphi_u(\vec{r}_1)\varphi_u(\vec{r}_2)\vec{\chi}_-$

sieht man durch Einsetzen in $\phi(x_1,x_2)$,

etwas schwerer ist $\underline{\varphi_+\vec{\chi}_-}$:

$$\varphi_+\vec{\chi}_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_{u_1}(\vec{r}_1)\,\varphi_{u_2}(\vec{r}_2)+\varphi_{u_2}(\vec{r}_1)\,\varphi_{u_1}(\vec{r}_2)\right)\left(\vec{\chi}_{s_1}(s_1)\,\vec{\chi}_{s_2}(s_2)-\vec{\chi}_{s_2}(s_1)\,\vec{\chi}_{s_1}(s_2)\right)$$

$\phi(x_1,x_2)\ \hat{=}$

$\text{in } \phi(x_1, x_2) \hat{=}$ $\underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad}$

$n_1 \leftrightarrow n_2$ $\underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad}$

Die faktorisierte WF sind im Slaterdeterminantenansatz enthalten.

b) physikalischer Inhalt

kompakte Formulierung in $\chi_\mp$ macht es mgl. nach Quantenzahlen des Gesamtspins zu klassifizieren:

Spin-QZ: $s_1 = \frac{1}{2}$, $s_2 = \frac{1}{2}$ $\Longrightarrow$ $S = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 0, 1$

Wellenfkt. mit Gesamtspin $S = 0, 1$.

$$M_{S=0} = 0, \quad M_{S=1} = \{0, \pm 1\}$$

$\rightarrow$ 4 linear unabhängige Wellenfunktionen

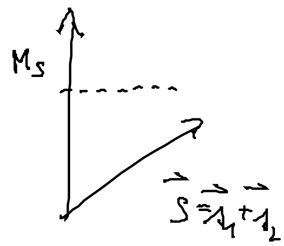
$$\{ |\underline{\underline{S}}, \underline{\underline{M_S}} \rangle \} \hat{=} \{ |0,0\rangle, |1,0\rangle, |1,1\rangle, |1,-1\rangle \}$$

alte Basis auch 4 Zustände:

$$\{ |\underline{\underline{m_{s_1}}}\, \underline{\underline{m_{s_2}}} \rangle \} \hat{=} \{ |\underbrace{\uparrow\uparrow}_{\vec{\chi}_{\frac{1}{2}} \vec{\chi}_{\frac{1}{2}}} \rangle, |\underbrace{\downarrow\downarrow}_{\vec{\chi}_{-\frac{1}{2}} \vec{\chi}_{-\frac{1}{2}}} \rangle, |\underbrace{\uparrow\downarrow}_{\vec{\chi}_{-\frac{1}{2}} \vec{\chi}_{+\frac{1}{2}}} \rangle, |\underbrace{\downarrow\uparrow}_{\vec{\chi}_{+\frac{1}{2}} \vec{\chi}_{-\frac{1}{2}}} \rangle \}$$

Zusammenhang der Zustände über Clebsch-Gordan Koeffizienten:

$$S \begin{cases} |1,-1\rangle = |\downarrow\rangle_1 \, |\downarrow\rangle_2 & \downarrow\downarrow \\ |1,+1\rangle = |\uparrow\rangle_1 \, |\uparrow\rangle_2 & \uparrow\uparrow \\ |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_1 \right) & \rightarrow\rightarrow \end{cases}$$



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

$S=1$: parallele Spins, $S=0$ antiparallele Spins

symmetrisch antisymmetrisch

Clebsch-Gordan Koeffizienten ergeben sich aus:

$$|S, M_S\rangle = \sum_{m_s m_{s'}} \underbrace{\langle m_s m_{s'} | S, M_S \rangle}_{} \, |m_s m_{s'}\rangle$$

werden mit Hilfe der Eigenwertproblems von $\vec{S}$, $\vec{S}_z$, $\vec{S}_1$, $\vec{S}_2$, S_1^z, S_2^z berechnet