

• DAS REALE WASSERSTOFFATOM

- Unsere Diskussion des Wasserstoffatoms war auf den Hamilton-Operator

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{ze^2}{r}$$

aufgebaut. Wir wollen nun eine realistische Beschreibung des Wasserstoffatoms erreichen, und dafür müssen wir an \hat{H}_0 einige Korrekturen anbringen.

• RELATIVISTISCHE KORREKTUREN

- Zunächst ändert sich der Ausdruck der kinetischen Energie des Elektrons, wenn man relativistische Korrekturen berücksichtigt.
- Die gesamte kinetische Energie für das System Elektron-Proton ist: $\frac{Pe^2}{2m} + \frac{Pp^2}{2M}$ (nicht relativistisch).

Aber relativistisch: $\frac{Pe^2}{2m} \rightarrow (Pe^2 c^2 + m^2 c^4)^{1/2} \simeq$
 $\simeq mc^2 + \frac{Pe^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{(p^2)^2}{m^3 c^2} + \dots$

Der erste Term, mc^2 , ist irrelevant (einfach eine Konstante). Also nur \hat{H}_0 tritt eine relativistische Korrektur:

$$\boxed{\hat{H}_1 = -\frac{1}{8} \frac{(p^2)^2}{m^3 c^2}}$$

- * Wie groß ist diese Korrektur?

Wir können eine einfache Einschätzung machen:

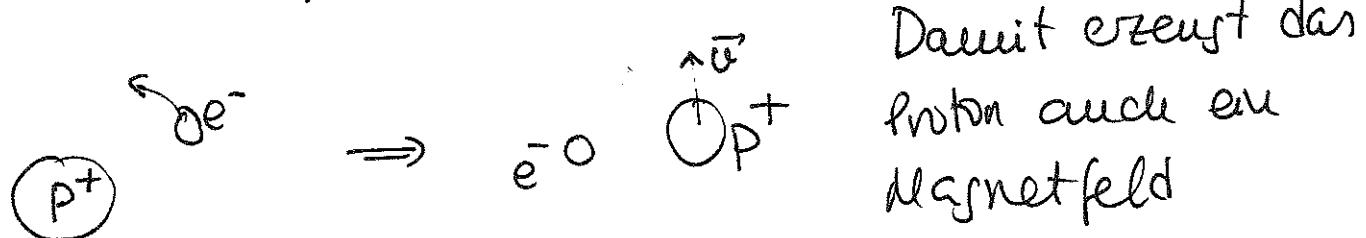
$$\frac{\langle \hat{A}_1 \rangle}{\langle \hat{H}_0 \rangle} \approx \frac{(P^4 / 8m^3 c^2)}{(P^2 / 2m)} \approx \frac{\langle P^2 \rangle}{m^2 c^2} \approx 10^{-5} \text{ für Wasserstoff}$$

$$(\text{für H-Atome}, \langle P^2 \rangle \approx (mc\alpha)^2 \implies \frac{\langle \hat{A}_1 \rangle}{\langle \hat{H}_0 \rangle} \approx \alpha^2 \approx 10^{-4})$$

- * Die Korrektur ist also klein. Eigentlich ist die Korrektur sogar kleiner als die durch die reduzierte Masse bewirkte Korrektur (also die Tatsache, dass $\mu \neq m$).

LS - KOPPLUNG (SPIN-BAHN KOPPLUNG)

- Der Elektronenspin erfordert eine weite Korrektur von gleicher Größenordnung. Es ist relativ einfach zu verstehen, warum.
- Da das Elektron sich um das Proton bewegt, "sieht" das Elektron nicht nur das ~~elektrische~~ Feld des Protons, sondern auch ein zusätzliches Magnetfeld. Das ist einfach zu verstehen. Von einem mit dem Elektron verbundenen Koordinatensystem aus bewegt sich das Proton



(Bemerkung: Ich erinnere euch die Maxwell-Gleichungen)

- Wäre die Relativbewegung geradlinig, so wäre das um Elektron gesehene Magnetfeld $(-\vec{\Phi}) \times \vec{E} / c = \vec{B}$.

- \vec{B} wechselwirkt mit dem magnetischen Moment des Elektrons (also mit dem Spin). Wir könnten also eine Wechselwirkung in folgender Form erwarten:

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{e}{mc} \vec{S} \cdot \vec{B} = \frac{-e}{mc^2} \vec{S} \cdot (\vec{v} \times \vec{E}) = \vec{E} = -\nabla \phi(r) \quad \phi(r) = +2e^*/r$$

$\vec{B} = -\frac{1}{c}(\vec{v} \times \vec{E})$

↑ Potential der Kernladung

$$= +\frac{e}{m^2 c^2} \vec{S} \cdot (\vec{p} \times \nabla \phi) = \rightarrow \nabla \phi(r) = \vec{L}_r \frac{d\phi}{dr} = \vec{r} \cdot \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr}$$

$$= +\frac{e}{m^2 c^2} \vec{S} \cdot (\vec{p} \times \vec{r}) \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr}$$

$$= -\frac{1}{m^2 c^2} \vec{S} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) \frac{1}{r} \frac{d}{dr}(e\phi) = \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad \phi(r) = +2e^*/r$$

$$= -\frac{1}{m^2 c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr}(e\phi)$$

- In Wirklichkeit ist diese Erwartung aber nicht ganz richtig. Relativistische Effekte zusammen mit der nicht geradlinigen Bewegung reduzieren den obigen Ausdruck um einen Faktor 2. Also der korrekte Störoperator ist

$$\boxed{\hat{H}_2 = \frac{-1}{2m^2 c^2} \vec{L} \cdot \vec{S} - \frac{1}{r} \frac{d(e\phi)}{dr} = \frac{ze^2}{2m^2 c^2 r^3} \vec{L} \cdot \vec{S}}$$

Wir können eine Einschätzung machen: $\frac{\langle H_2 \rangle}{\langle H_0 \rangle} \sim \frac{e^2 t^2 / m^2 c^2 a_0^3}{e^2 / a_0} = \frac{t^2}{m^2 c^2 a_0^2} \sim \alpha^2 = \left(\frac{1}{137}\right)^2 \approx 10^{-4}$
 Also \hat{H}_1 und \hat{H}_2 sind ungefähr von derselben Größenordnung.

- Wir wollen nun die Störungstheorie 1. Ordnung anwenden, um die Auswirkung um \hat{H}_1 und \hat{H}_2 auf das Spektrum des H-Atoms zu sehen. (Wir benutzen entartete Störungstheorie für Zustände derselben n)

- Fangen wir mit \hat{H}_1 an:

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2} = -\frac{1}{2mc^2} \left(\frac{p^2}{2m} \right)^2 = \\ = -\frac{1}{2mc^2} \left(\hat{H}_0 + \frac{ze^2}{r} \right) \left(\hat{H}_0 + \frac{ze^2}{r} \right)$$

hier vernachlässigen wir der Unterschied zwischen p und m , der eigentlich höher-Ordnung Korrekturen geben würde

d. h.: (Bemerkung: \hat{H}_1 hängt nicht vom Winkel ab, und deswegen mischt nicht Zustände mit verschiedenen l und m)

$$\langle \phi_{nem} | \hat{H}_1 | \phi_{nem} \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \langle \phi_{nem} | \left(\hat{H}_0 + \frac{ze^2}{r} \right) \left(\hat{H}_0 + \frac{ze^2}{r} \right) | \phi_{nem} \rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \left[E_n^2 + 2E_n ze^2 \langle \frac{1}{r} \rangle_{ne} + (ze^2)^2 \langle \frac{1}{r^2} \rangle_{ne} \right]$$

wobei $\langle \frac{1}{r} \rangle_{ne} \equiv \langle \phi_{nem} | \frac{1}{r} | \phi_{nem} \rangle = \frac{z}{a_0 n^2}$

$$\langle \frac{1}{r^2} \rangle_{ne} \equiv \langle \phi_{nem} | \frac{1}{r^2} | \phi_{nem} \rangle = \frac{z^2}{a_0^2 n^3 (l+1/2)}$$

also:

$$\langle \phi_{nem} | \hat{H}_1 | \phi_{nem} \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \left[\left(\frac{mc^2 (2\alpha)^2}{2n^2} \right)^2 - 2ze^2 \frac{mc^2 (2\alpha)^2}{2n^2} \left(\frac{z}{a_0 n^2} \right) \right] \\ + (ze^2)^2 \frac{\frac{z^2}{a_0^2 n^3 (l+1/2)}}{}$$

$$= -\frac{mc^2}{2} (2\alpha)^2 \left[\frac{(2\alpha)^2}{n^3 (l+1/2)} - \frac{3(2\alpha)^2}{4n^4} \right]$$

$$= \frac{mc^2}{4} (2\alpha)^4 \left[\frac{3}{2n^4} - \frac{2}{n^3 (l+1/2)} \right]$$

- * Der Elektronenspin geht in diese Energiedifferenz nicht ein, da A_1 unabhängig vom Spin ist.

- * Im Gegenteil hängt \hat{H}_2 von Spin ab:

$$\hat{H}_2 = \frac{ze^2}{2m^2c^2r^3} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}}$$

Bei gegebenem n und l gibt es $2(2l+1)$ entartete Eigenzustände von \hat{A}_0 (der Vorfaktor 2 kommt von den beiden Spinzuständen). Also wir haben hier ein Beispiel für Störungstheorie an entarteten Zuständen. Also die Berechnung der Energiedifferenz erfordert die Diagonalisierung einer Submatrix (für die entartete Zst.)

- * Erstmal arbeiten wir mit der Zusammensetzung von $\hat{\vec{L}}$ und $\hat{\vec{S}}$:

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}} \quad \rightarrow \quad \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}} = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$$

* Unseren entarteten Eigenfunktionen $|l, m_l; s, m_s\rangle$ und Eigenfunktionen von $\{\hat{L}^2, L_z, \hat{S}^2, S_z\}$. Wenn wir nun diese Eigenfunktionen über die Clebsch-Gordan-Koeffizienten (ich erinnere euch unsere Diskussion über die Clebsch-Gordan-Koeffizienten) dann erhalten wir die Basis der Eigenfunktionen $|j, m_j; l, s\rangle$ von $\{\hat{J}^2, J_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2\}$. Die Elementarfunktionen $|j, m_j; l, s\rangle$ sind ^{noch} die richtige Kombinationen, die dieser neuen Basis und schon die richtige Kombinationen, die die Submatrix von \hat{H}_2 diagonalisieren.

- * Da $s=1/2$ für das Elektron, dann $j = \{|l-1/2|$

* Also für $j = \ell + 1/2$

$$\begin{aligned} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}} | \ell + \frac{1}{2}, m_j; \ell, \frac{1}{2} \rangle &= \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2) | \ell + \frac{1}{2}, m_j; \ell, \frac{1}{2} \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \left[(\ell + 1/2)(\ell + 3/2) - \ell(\ell + 1) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \right] | \ell + \frac{1}{2}, m_j; \ell, \frac{1}{2} \rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \ell | \ell + \frac{1}{2}, m_j; \ell, \frac{1}{2} \rangle \end{aligned}$$

und für $j = \ell - 1/2$ $\ell = 0$ gibt Null

$$\begin{aligned} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}} | |\ell - \frac{1}{2}|, m_j; \ell, \frac{1}{2} \rangle &\stackrel{\downarrow}{=} \frac{\hbar^2}{2} \left[(\ell - \frac{1}{2})(\ell + \frac{1}{2}) - \ell(\ell + 1) - \frac{3}{4} \right] | \ell - \frac{1}{2}, m_j; \ell, \frac{1}{2} \rangle = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} (\ell + 1) | \ell - \frac{1}{2}, m_j; \ell, \frac{1}{2} \rangle \end{aligned}$$

* Für gegebenes ℓ hatten wir $2(2\ell+1)$ entartete Zustände (für \hat{A}_0).
Nun wegen \hat{A}_2 sind diese Zustände in 2 Teile gespalten:

- $2(\ell + 1/2) + 1$ Zustände mit $j_1 = \ell + 1/2$
- $2(\ell - 1/2) + 1$ Zustände mit $j_2 = \ell - 1/2$

* Für $j_1 = \ell + 1/2 \Rightarrow |\Phi_{n,j_1 m_\ell}\rangle$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{n,j_1 m_\ell} | \hat{A}_2 | \Phi_{n,j_1 m_\ell} \rangle &= \frac{ze^2}{2m^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{L}} \right\rangle \\ &= \frac{ze^2}{2m^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} \ell \int_0^\infty r^2 dr [R_{nl}(r)]^2 \frac{1}{r^3} \end{aligned}$$

$$\text{wobei } \int_0^\infty r^2 dr [R_{nl}(r)]^2 \frac{1}{r^3} = \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nl} = \frac{z^3}{a_0^3} \frac{1}{n^3 \ell (\ell + \frac{1}{2})(\ell + 1)}$$

* Für $j_2 = \ell - 1/2$:

$$\langle \Phi_{n,j_2 m_\ell} | \hat{A}_2 | \Phi_{n,j_2 m_\ell} \rangle = \frac{ze^2}{2m^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} (\ell + 1) \int_0^\infty r^2 dr [R_{nl}(r)]^2 \frac{1}{r^3}$$

* Also:

$$\langle \Phi_{n,j,\text{me}} | \hat{H}_2 | \Phi_{n,j,\text{me}} \rangle = \frac{mc^2(2\alpha)^4}{4} \frac{l}{n^3 l(l+1/2)(l+1)}$$

$$\langle \Phi_{n,j_2 \text{me}} | \hat{A}_2 | \Phi_{n,j_2 \text{me}} \rangle = \frac{mc^2(2\alpha)^4}{4} \frac{[-l-1]}{n^3 l(l+1/2)(l+1)}$$

* Nun werden wir die 2 Verschiebungen (also für \hat{A}_1 und für \hat{A}_2) addieren:

$$\begin{aligned} & \frac{mc^2}{4} (2\alpha)^4 \left[\frac{3}{2n^4} - \frac{2}{n^3(l+1/2)} + \frac{\begin{cases} l \\ -(l+1) \end{cases}}{n^3(l+1/2)l(l+1)} \right] \\ &= \frac{mc^2}{4} (2\alpha)^4 \left[\frac{3}{2n^4} + \frac{1}{n^3(l+1/2)l(l+1)} \begin{cases} -2l(l+1) + l \\ -2l(l+1) - (l+1) \end{cases} \right] \\ &= \frac{mc^2}{4} (2\alpha)^4 \left[\frac{3}{2n^4} + \frac{2}{n^3} \begin{cases} \frac{1}{l+1} & \leftarrow \text{für } j = l+1/2 \\ \frac{1}{l} & \leftarrow \text{für } j = l-1/2 \end{cases} \right] \\ &= \frac{mc^2}{4} (2\alpha)^4 \left[\frac{3}{2n^4} - \frac{2}{n^3(j+1/2)} \right] \\ &= \boxed{-\frac{mc^2}{2} (2\alpha)^4 \frac{1}{n^3} \left[\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right] = \Delta E_f} \quad \begin{array}{l} \text{(Bemerkung: das Ergebnis ist} \\ \text{auch für } l=0 \text{ gültig, aber um} \\ \text{den zu teuren braucht man} \\ \text{die relativistische Dirac-Gleichung)} \end{array} \end{aligned}$$

* Diese Energieschreibungen spalten Zustände die für \hat{A}_0 allein entstehen, und bilden damit die sogen. Feinstruktur.

* Sehen wir nun als Beispiel die Feinstruktur von $n=2$:

Für $n=2$ haben wir ^{mehrere} entartete Zustände: $2 \times n^2 = 8$

wegen
Spin

Für $n=2 \rightarrow l=0, 1$

$$\text{Da } s = 1/2 \xrightarrow{l=0} j = \frac{1}{2} \Rightarrow {}^2S_{1/2} \leftarrow 2 \text{ Zustände}$$

$$\xrightarrow{l=1} \begin{cases} j = 1/2 \\ j = 3/2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} {}^2P_{1/2} \leftarrow 2 \text{ Zustände} \\ {}^2P_{3/2} \leftarrow 4 \text{ Zustände} \end{cases}$$

(Bemerkung: wir folgen hier die Notation)

$$\sum_j^n \quad n = \text{Hauptquantenzahl}$$

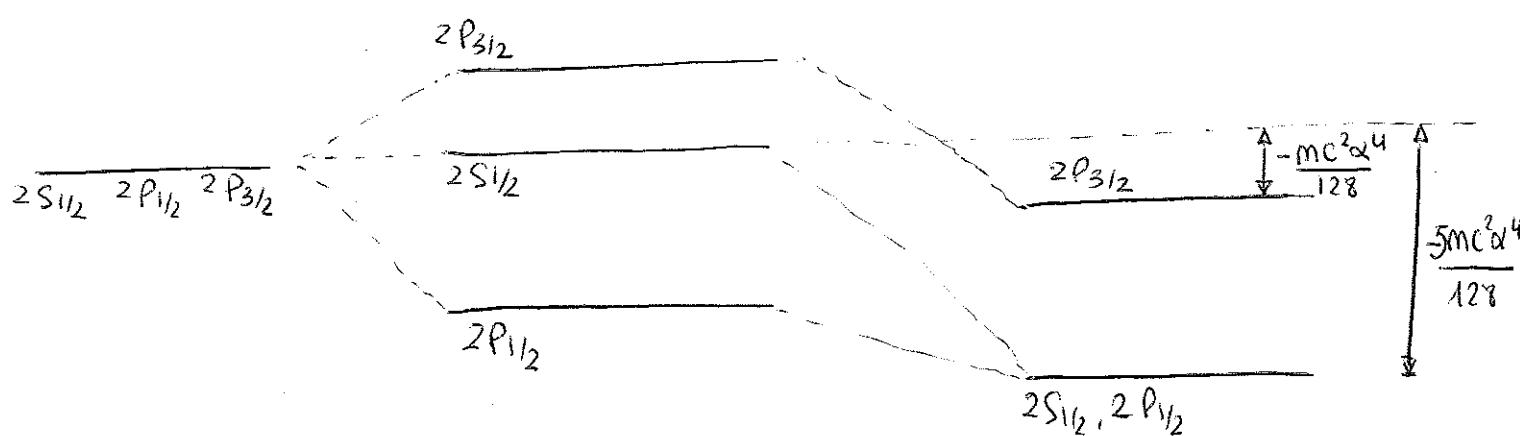
$$\Sigma \equiv S(l=0), P(l=1), \dots$$

* Die Aufspaltung der Niveaus sieht so aus:

Nur \hat{H}_0

$\hat{H}_0 + LS\text{-Kopplung}$

$\hat{H}_0 + LS\text{-Kop. + Relativistische Effekte}$



* Also die Feinstruktur zerstört nicht die Entartung zwischen ${}^2S_{1/2}$ und ${}^2P_{1/2}$. Eigentlich genauere Korrekturen (Lamb-Effekt) zeigen, daß auch diese 2 Zustände nicht genau entartet sind.

(Bemerkung: Der Lamb-Effekt kommt aus der Wechselwirkung des Elektrons mit seinem eigenen elektromagnetischen Feld).

• ZEEMAN-EFFEKT

- Wir werden nun sehen was passiert wenn die H-Atome in einem Magnetfeld sind.
- Wir haben schon \vec{L} eine andere Vorlesung gesehen, daß der Drehimpuls mit dem Magnetfeld koppelt, und das sagen. Zeeman-Effekt verschiebt die Eigenenergien. Aber damals haben wir nicht den Spin einbezogen. Nun können wir eine bessere Theorie des Zeeman-Effektes machen.
- Nun das Magnetfeld koppelt mit
 - * Dem magnetischen Moment $\vec{\mu}_L = \frac{-e}{2mc} \vec{L}$ aus dem Bahndrehimpuls \vec{L}
 - * Dem magnetischen Moment $\vec{\mu}_S = \frac{-eg}{2mc} \vec{S}$ aus dem Spindrehimpuls \vec{S} (wobei $g \approx 2$)

Die Energieschichtung wegen der Kopplung zwischen Magnetfeld und magnetischen Moment ist (wie schon gesehen) der Form $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Hier haben wir also zwei Verschiebungen die sich addieren: $\hat{H}_z = -\vec{\mu}_L \cdot \vec{B} - \vec{\mu}_S \cdot \vec{B} = \frac{e}{2mc} (\vec{L}_z + 2\vec{S}_z) \cdot \vec{B}$

Sagen wir, daß $\vec{B} = B \hat{B}_z$, dann die Störoperator ist der Form:

$$\boxed{\hat{H}_z = \frac{e}{2mc} B (\hat{L}_z + 2\hat{S}_z)}$$

- Als ungestörten Hamilton-Operator verwenden wir das übliche \hat{H}_1 aber dreimal mit dem Spin-Bahn Term \hat{A}_2 (wir nehmen hier \hat{A}_1 (relativistischer Effekt) weil \hat{A}_1 spin unabhängig ist).

$$\hat{H}_0 = \frac{P^2}{2\mu} - \frac{ze^2}{r} + \frac{1}{2mc^2} \frac{ze^2}{r^3} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Wir addieren die LS-Kopplung zu \hat{H}_0 , weil die Störung \hat{H}_2 klein sein kann gegenüber der LS-Kopplung.

- * Die Eigenzustände von \hat{H}_0 sind also nur der Form $|jm; l, s\rangle$, also Eigenzustände von $\{\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2, \hat{S}^2\}$ wobei $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$.

In dieser Basis:

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$$

$$\begin{aligned} \langle jm; l, s | \hat{H}_2 | jm; l, s \rangle &= \frac{eB}{2mc} \langle jm; l, s | (\hat{J}_z + \hat{S}_z) | jm; l, s \rangle \\ &= \frac{eB}{2mc} \left[t_{jm; l} + \underbrace{\langle jm; l, s | \hat{S}_z | jm; l, s \rangle}_{\text{}} \right] \end{aligned}$$

Um dieses Matrixelement zu finden, müssen wir $|jm; l, s\rangle$ als Linearkombination von $|l, m; s, ms\rangle$ schreiben ($m_j = m + ms$)

$$\begin{aligned} |jm; l, s\rangle &= \langle jm; l, m_j - 1/2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle |l, m_j - 1/2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle \\ &\quad + \langle jm; l, m_j + 1/2; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle |l, m_j + 1/2; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle \end{aligned}$$

Clebsch-Gordan-Koeffizienten

$$\begin{aligned} \text{Dann: } \langle jm; l, s | \hat{S}_z | jm; l, s \rangle &= |\langle jm; l, m_j - 1/2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \rangle|^2 \times \frac{t_u}{2} \\ &\quad + |\langle jm; l, m_j + 1/2; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \rangle|^2 \times \left(-\frac{t_u}{2}\right) \end{aligned}$$

* Da $s = 1/2 \rightarrow j = \ell - 1/2, \ell + 1/2$

* Für $j = \ell + 1/2$, und aus der Form der Debsch-Gordan-Koeffizienten

$$\langle \ell + \frac{1}{2}, m_j; \ell, s | \hat{\mu}_z | \ell + \frac{1}{2}, m_j; \ell, s \rangle = \frac{eB}{2MC} \left[t_m m_j + \frac{t_m m_j}{2\ell+1} \right]$$

Für $j = \ell - 1/2$:

$$\langle \ell - \frac{1}{2}, m_j; \ell, s | \hat{\mu}_z | \ell - \frac{1}{2}, m_j; \ell, s \rangle = \frac{eB}{2MC} \left[t_m m_j - \frac{t_m m_j}{2\ell+1} \right]$$

* Also die Energiedifferenz wegen des Magnetfeldes ist:

$$\boxed{\Delta E_z = \frac{et_e B}{2MC} m_j \left(1 \pm \frac{1}{2\ell+1} \right)} \quad \text{für } j = \ell \pm 1/2$$

* Nehmen wir noch mal als Beispiel die $n=2$ Zustände.

$$2P_{3/2} \rightarrow \left. \begin{array}{l} \ell=1 \\ j=3/2 \end{array} \right\} \Delta E_z = \varepsilon \times \frac{4}{3} m_j \quad (\text{wobei } \varepsilon = \frac{et_e B}{2MC})$$

$$2P_{1/2} \rightarrow \left. \begin{array}{l} \ell=1 \\ j=1/2 \end{array} \right\} \Delta E_z = \varepsilon \times \frac{2}{3} m_j$$

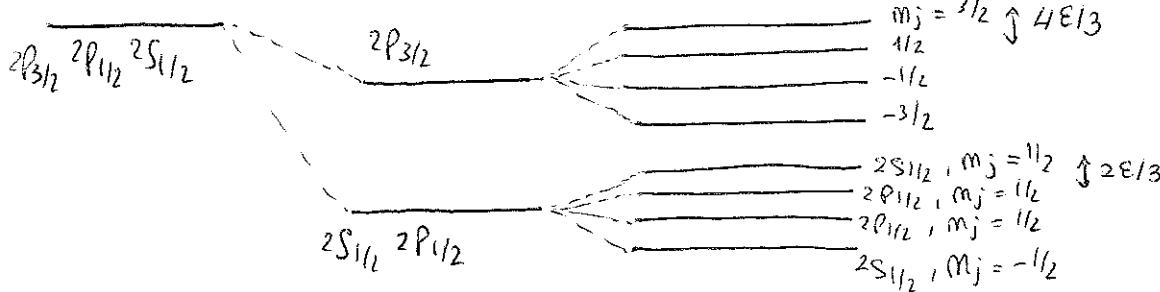
$$2S_{1/2} \rightarrow \left. \begin{array}{l} \ell=0 \\ j=1/2 \end{array} \right\} \Delta E_z = \varepsilon \times 2 m_j$$

* Also:

$$H_0 = \frac{e^2 B}{2m} \frac{Z e^2}{r}$$

+ Feinstruktur

+ Zeeman-Effekt



* Wenn \vec{B} ist sehr stark, dann können wir die LS Kopplung vernachlässigen, und wir dürfen die Zustände $|\ell, m; s, m_s\rangle$ einfach so verwenden:

$$\cdot \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{ze^2}{r}$$

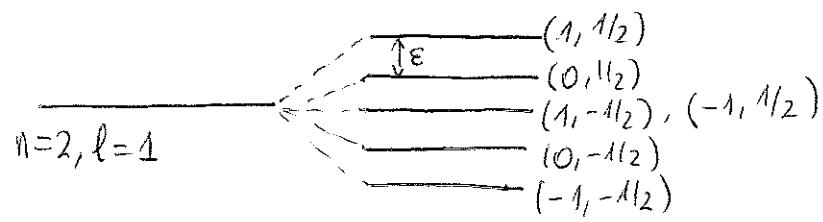
$$\cdot \langle \ell, m; s, m_s | \hat{H}_1 | \ell, m; s, m_s \rangle = -\frac{e\mu B}{2mc} (m + 2m_s) = \epsilon (m + 2m_s)$$

* Dann, für $n=2, \ell=1$ (also 2P Zustände) haben wir

$$5 \text{ Niveaus: } m=1, m_J=\pm 1/2 \rightarrow \epsilon(1\pm 1) \xleftarrow[0]{2\epsilon}$$

$$m=0, m_J=\pm 1/2 \rightarrow \pm \epsilon \xleftarrow[-\epsilon]{\epsilon}$$

$$m=-1, m_J=\pm 1/2 \rightarrow \epsilon(-1\pm 1) \xleftarrow[-2\epsilon]{\epsilon}$$



• DIE HYPERFEINSTRUKTUR

- * Es gibt noch eine relativ wichtig Energiekorrektur, und zwar die sogen. Hyperfeinstuktur.
- * Bisler haben wir das Proton (bzw. der Kern) als einen Massenpunkt. Tatsächlich ist das Proton wie das Elektron ein spin-1/2 Teilchen. Im Allgemeinen, bezeichnen wir den Kernspin mit \hat{I} . Zum Spin \hat{I} gehört ein magnetisches Dipolmoment

$$\hat{\mu}_I = \frac{ze\gamma_N}{2M_N c} \hat{I}$$

Wobei γ_N = gynomagnetische Verhältnis (für das Proton) $\gamma_p \approx 5,585$

M_N = die Kernmasse (für das Proton etwa 2000)
größer als die Elektronnmasse

- * Ein punktförmiges Dipol $\vec{\mu}_I$ verzeugt ein Magnetfeld

$$\vec{B}_I = -\frac{1}{4\pi} \vec{\mu}_I \nabla^2 \frac{1}{r} + \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} [\vec{\mu}_I \cdot \vec{\nabla}] \frac{1}{r}$$

- * Die Hyperfeinsplaltung führt her von diesem Magnetfeld. Der Störoperator kommt aus der Wechselwirkung zwischen \vec{B}_I und dem magnetischen Dipolmoment des Elektrons:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{HF} &= -\hat{\mu}_e \cdot \vec{B}_I = \frac{e}{mc} \vec{s} \cdot \vec{B}_I = \\ &= \frac{ze^2 \gamma_N}{2M_N c^2} \frac{1}{4\pi} \vec{s} \cdot \left[-\vec{I} \nabla^2 \frac{1}{r} + \vec{\nabla} (\vec{I} \cdot \vec{\nabla}) \frac{1}{r} \right] \end{aligned}$$

- * Erstmal werden wir die Größeordnung der Hyperfeinsplaltung stellen.

* Für die Einschätzung der Graviposition, nehmen wir
 $S \sim \hbar$; $I \sim \hbar$; $\frac{1}{r} \sim \frac{1}{a_0}$; $\nabla \sim \frac{1}{a_0}$

Also: $H_{HF} \sim \frac{ze^2 g_N}{2mM_N c^2} \frac{\hbar^2}{4\pi a_0^3} = \frac{g_N}{8\pi} (2\alpha)^4 \left(\frac{m}{M_N}\right) mc^2$

* $H_F \sim \frac{(2\alpha)^4}{2} mc^2$

• Also $\frac{H_{HF}}{H_F} \sim \frac{n}{M_N} \sim \frac{1}{200}$

Also die Hyperfeinspalting ist viel kleiner als die Feinstruktur (daher der Name Hyperfeinspalting).

• Als Beispiel wollen wir die Hyperfeinstruktur des $n=1$ -Niveaus.

Für $n=1$, $l=0 \rightarrow 1S_{1/2}$ Zustände.

• Fein-Verschiebung: $\Delta E_f = -\frac{mc^2}{8} (2\alpha)^4$

* Für $l=0 \rightarrow \Phi_{100}(\vec{r}) = \phi_{100}(r)$ da $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$.

D_{C^*N} :

$$\begin{aligned} \Delta E_{HF} &= \int d\vec{r} \Phi_{100}(\vec{r})^* \hat{H}_{HF} \Phi_{100}(\vec{r}) = \\ &= \frac{ze^2 g_N}{8\pi m M_N c^2} \int d^3 r \Phi_{100}(\vec{r})^* \left\{ -\vec{S} \cdot \vec{I} \nabla^2 \frac{1}{r} + (\vec{S} \cdot \vec{\nabla}) (\vec{I} \cdot \vec{\nabla}) \frac{1}{r} \right\} \Phi_{100}(\vec{r}) \end{aligned}$$

* Nehmen wir den 2. Glied des Integrals:

$$\int d^3 r |\Phi_{100}(\vec{r})|^2 (\vec{S} \cdot \vec{\nabla}) (\vec{I} \cdot \vec{\nabla}) \frac{1}{r} = \sum_{i,k} \int d^3 r |\Phi_{100}(\vec{r})|^2 S_i T_k \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{1}{r}$$

Da alle Terme des Integranden mit Ausnahme der Ableitungen sphärische Symmetrie aufweisen, so verschwindet die Integrale für $i \neq k$. Auf dem gleichen Grund sind alle $(i=k)$ -Beiträge

gleich, und damit

$$\begin{aligned} \sum_i \int d^3 r |\phi_{100}(\vec{r})|^2 \hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{I}}_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \frac{1}{r} &= \\ = \sum_i \hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{I}}_i \frac{1}{3} \int d^3 r |\phi_{100}(\vec{r})|^2 \nabla^2 \frac{1}{r} & \\ = \frac{1}{3} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{I}} \int d^3 r |\phi_{100}(\vec{r})|^2 \nabla^2 \frac{1}{r} & \end{aligned}$$

Also:

$$\begin{aligned} \Delta E_{HF} &= \frac{ze^2 g_N}{8\pi M N_C c^2} \int d^3 r |\phi_{100}(\vec{r})|^2 \left\{ -\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{I}} \nabla^2 \frac{1}{r} + \frac{1}{3} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{I}} \nabla^2 \frac{1}{r} \right\} \\ &= -\frac{ze^2 g_N}{12\pi M N_C c^2} \underbrace{\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{I}} \int d^3 r |\phi_{100}(\vec{r})|^2 \left(\nabla^2 \frac{1}{r} \right)}_{-4\pi \delta(F)} \\ &= \frac{ze^2 g_N}{3m M N_C c^2} \hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{I}} \cdot \underbrace{\int d^3 r |\phi_{100}(\vec{r})|^2 \delta(\vec{r})}_{|R_{10}(0)|^2} \longrightarrow 4 \left(\frac{ze^2 m c}{\hbar} \right)^3 \\ \Rightarrow \Delta E_{HF} &= \frac{4}{3} g_N \frac{m}{M_N} (ze)^4 m c^2 \cancel{\left(\frac{\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{I}}}{\hbar^2} \right)} = A \left(\frac{\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{I}}}{\hbar^2} \right) \end{aligned}$$

Sei $\hat{\vec{F}} = \hat{\vec{S}} + \hat{\vec{I}}$ der gesamte Spin des Elektrons und Kerls

dann $\frac{\hat{\vec{S}} \cdot \hat{\vec{I}}}{\hbar^2} = \frac{1}{2\hbar^2} (\hat{\vec{F}}^2 - \hat{\vec{S}}^2 - \hat{\vec{I}}^2) \rightarrow \frac{1}{2} [F(F+1) - \frac{3}{4} - I(I+1)]$

* Wir gehen von der Basis $|s, m_s; i, m_i\rangle$ im Eigenzustand aus
 um $\{\hat{\vec{S}}^2, \hat{S}_z, \hat{\vec{I}}^2, \hat{I}_z\}$ zu $|f, m_f; i, s\rangle$, also die Eigenzustände
 um $\{\hat{\vec{F}}^2, \hat{F}_z, \hat{\vec{S}}^2, \hat{I}^2\}$.

* Da $J = 1/2$, dann $f = \pm 1/2$, $\pm 1/2$

$$f = i + 1/2 \rightarrow \Delta E_{HF} = \frac{A}{2} i$$

$$f = i - 1/2 \rightarrow \Delta E_{HF} = -\frac{A}{2} (i+1)$$

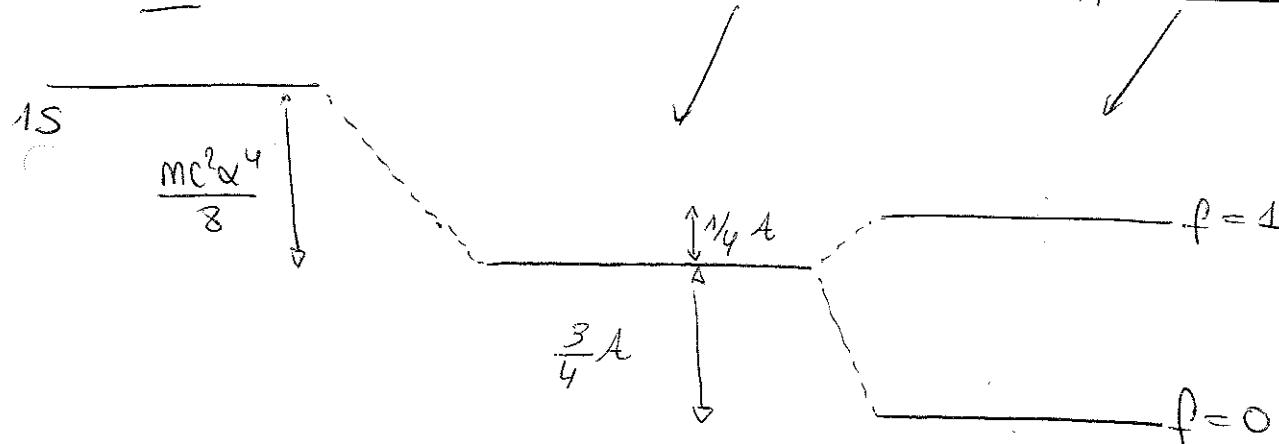
• Für Wasserstoffatomen $\rightarrow i = 1/2$

$$\rightarrow A = \frac{4}{3} g_F \frac{m}{M_N} (\cancel{\alpha})^4 mc^2$$

H_0

Fern-Verschmelzung

Hyperfeinstruktur



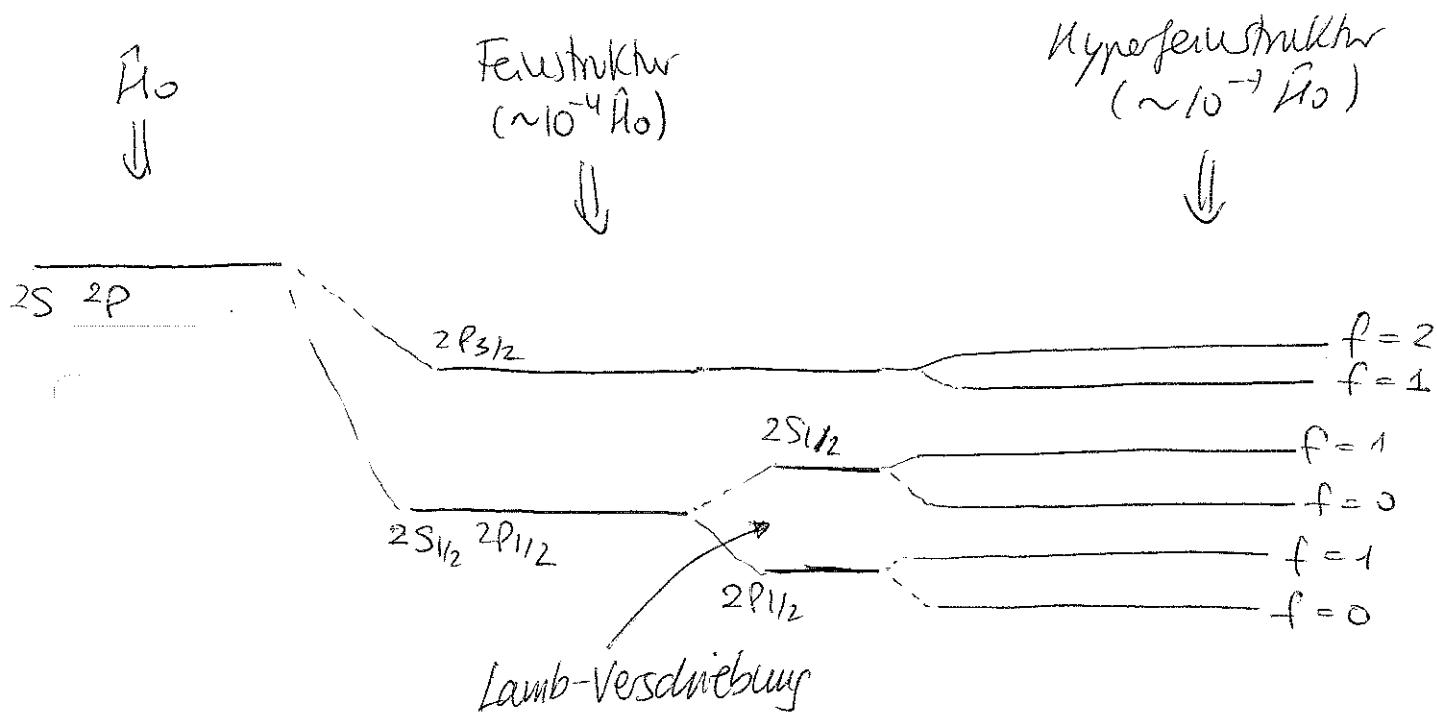
• Bei der Hyperfeinstruktur des Grundzustands des H-Atoms handelt es sich um eine physikalische Größe, die derzeit experimentell mit der größten Anzahl von Stellen bekannt ist

$$\Delta = 1420405751,768 \pm 0,001 \text{ Hz}$$

• Diese Übergang zwischen $f=1$ und $f=0$ im $1S$ Zustand des H-Atoms spielt eine sehr wichtige Rolle in der Radioastronomie. Ein Großteil davon, was wir über interstellare Wasserstoffwellen wissen, entstammt der Untersuchung dieser Übergang
Bemerkung: Atome in $f=1$ zerfallen spontan in $f=0$, und erzeugen damit ein Photon der Wellenlänge $\approx 21 \text{ cm.}$)

* Für andere Zustände mit $\ell > 0$, die Hyperfeinspalting ist zwischen Zustände mit verschiedenen Werten von f , wobei $\vec{F} = \vec{J} + \vec{S}$ ($\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$).

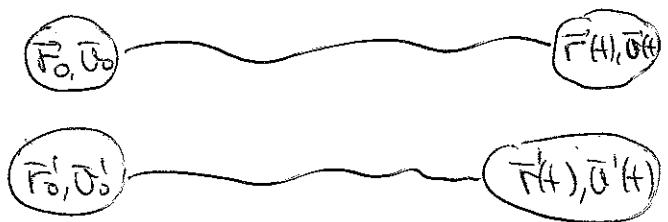
z.B. für $n=2$:



• SYSTEME IDENTISCHER TEILCHEN

- Bis her haben wir nur Probleme eines Teilchens gesehen
(Bemerkung: für H-Atome hatten wir Kern + Elektron, aber die spielen deutlich ganz verschiedene Rollen).
- Wir werden nun untersuchen, was passiert, wenn man identische Teilchen hat.
- Zwei Teilchen heißen identisch, wenn alle inneren Eigenschaften (Masse, Spin, Ladung, usw.) exakt übereinstimmen. Es gibt kein Experiment, mit dem man die Teilchen voneinander unterscheiden könnte.
- Wenn ein physikalisches System zwei identische Teilchen enthält, werden seine Eigenschaften und seine Zeitentwicklung nicht beeinflusst, wenn diese Teilchen ihre Rollen tauschen.

* In der Klassischen Mechanik stellt es kein besonderes Problem dar, wenn ein System aus identischen Teilchen besteht. Jeder Teilchen bewegt sich längs einer wohldefinierten Bahnkurve, durch die wir die Teilchen voneinander unterscheiden können, und sie während ihrer zeitlichen Entwicklung einzeln verfolgen können.



Da wir den Teilchen längs ihrer Bahn kontinuierlich folgen können, wissen wir zu jedem

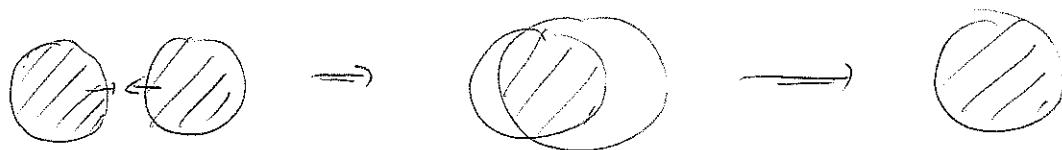
Zeitpunkt, wo sich das Teilchen (1) oder (2) befindet.
Deshalb betrachten wir das System so, wie wenn die beiden Teilchen verschieden wären.

- Die Situation in der Quantummechanik ändert sich grundlegend, da man den Teilchen keine wohldefinierten Bahnkurven zuweisen kann. Selbst wenn zur Zeit t_0 die Wellenpakete vollständig voneinander getrennt sind, können sie sich im weiteren Verlauf überlappen.
- Seien wir als konkretes Beispiel den Stoß zweier identischer Teilchen.

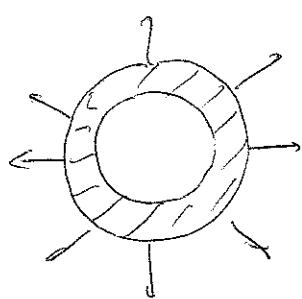


- Vor dem Stoß liegen 2 voneinander getrennte Wellenpakete vor, die sich aufeinander bewegen.
- Wir bezeichnen (1) (links) und (2) (rechts)

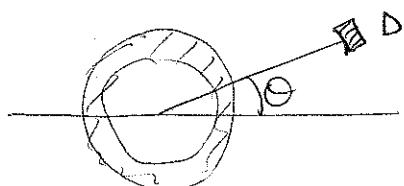
- Während des Stoßes überlappen die beiden Wellenpakete



Nach dem Stoß entspricht der Raumbereich, in dem die Wahrscheinlichkeitsdichte $\neq 0$ ist, einer Kugelschale, deren Radius wächst mit der Zeit

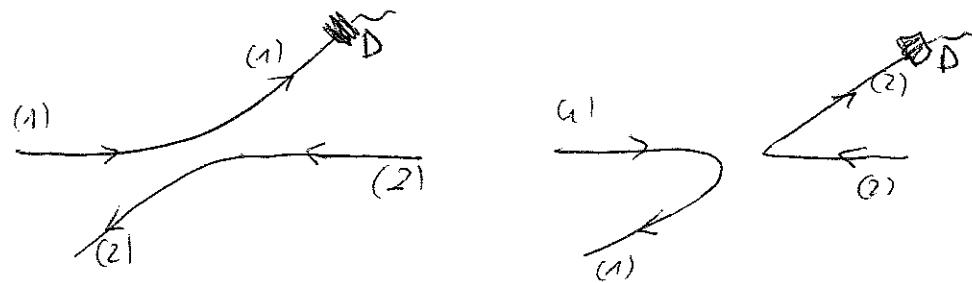


Sagen wir, daß wir ein Detektor D in einem Winkel θ platzieren:



Der Detektor detektiert ein Teilchen. Aufgrund der Impuls-erhaltung muß sich das andere Teilchen in die entgegengesetzte Richtung bewegen.

- Der Punkt ist, daß es unmöglich ist zu bestimmen, ob das in D detektierte Teilchen das anfangs mit (1) oder das mit (2) nummerierte Teilchen ist!



Es gibt 2 verschiedene Wege auf denen das System von dem Anfangszustand in den bei der Messung festgestellten Endzustand übergegangen sein kann.

Welchen Weg das System genommen hat, kann auf keine Weise festgestellt werden. Dies führt in der Quantumechanik zu einer grundsätzlichen Schwierigkeit.

Austauscharteartung

- * Sei ein System von 2 identischen Spin- $1/2$ Teilchen. Wir beschränken uns auf die Untersuchung der Spinfreiheitsgrade.
- * Wir nehmen hier an, daß die S_z Komponente ist $\pm 1/2$ für ein Teilchen und $\mp 1/2$ für das andere Teilchen.
- * Zur mathematischen Beschreibung des Systems numerieren wir die beiden Teilchen. Wir benutzen eine Basis $|E_1\rangle \otimes |E_2\rangle \equiv |E_1, E_2\rangle$
- diese ist die Orthonormalbasis aus der gemeinsamen Eigenvektoren von \hat{S}_{1z} (Eigenwert $E_1 \pm 1/2$) und \hat{S}_{2z} (Eigenwert $E_2 \pm 1/2$).

- * Wir können den betrachteten physikalischen Zustand durch einen der beiden orthogonalen Kets:

$$|\epsilon_1 = +, \epsilon_2 = - \rangle$$

$$|\epsilon_1 = -, \epsilon_2 = + \rangle$$

beschreiben. Diese Vektoren spannen einen 2D Unterraum auf, dessen normierte Vektoren:

$$\alpha |+ \rightarrow + \beta |- \rightarrow \quad \text{mit} \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

sind. Alle diese Zustände repräsentieren denselben physikalischen Zustand (also ein Spin zeigt nach oben und der andere nach unten). Dies bezeichnet man als Austauschentartung.

- Diese Entartung führt zu grundlegenden Schwierigkeiten, da die Messung verschiedener Observatoren ist, in Prinzip abhängig von gewählten Vektoren.

Nun muß eindeutig festlegen, welchen der Kets man verwenden will. Wir werden nun sehen, wie das möglich ist.

• PERMUTATIONSSOPERATOREN

• Wir betrachten 2 identische Teilchen. Beide Teilchen können in verschiedenen Zustände $\{|u_i\rangle\}$ sein. Also ein Zustand für die 2 Teilchen ist der Form:

$$|1; u_i ; 2; u_j \rangle \longrightarrow \underline{\text{2-Teilchen-Zustände}}$$

~~DEFINITION~~

$$(\text{Bewerktung: } |1; u_i ; 2; u_j \rangle \equiv |1; u_i \rangle \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Tensorprodukt}}}{\otimes} |2; u_j \rangle)$$

- * Die Reihenfolge der Vektoren spielt keine Rolle im Tensorprodukt, also:

$$|1:u_i; 2:u_j\rangle = |2:u_i; 1:u_j\rangle$$

- * Man definiert den Permutationsoperator \hat{P}_{21} als ein linearer Operator solch das:

$$\hat{P}_{21} |1:u_i; 2:u_j\rangle = |2:u_i; 1:u_j\rangle = |1:u_j; 2:u_i\rangle$$

- * Natürlich:

$$\hat{P}_{21}^2 |1:u_i; 2:u_j\rangle = \hat{P}_{21} |1:u_j; 2:u_i\rangle = |1:u_i; 2:u_j\rangle$$

Also $\boxed{\hat{P}_{21}^2 = \hat{1}}$

- * Außerdem:

$$\langle 1:u_i; 2:u_j | \hat{P}_{21} | 1:u_i; 2:u_j \rangle = \langle 1:u_i; 2:u_j | 1:u_j; 2:u_i \rangle = \delta_{ij} \delta_{ji}$$

und

$$\begin{aligned} \langle 1:u_i; 2:u_j | \hat{P}_{21}^\dagger | 1:u_i; 2:u_j \rangle &= (\langle 1:u_i; 2:u_j | \hat{P}_{21} | 1:u_i; 2:u_j \rangle)^* \\ &= (\langle 1:u_i; 2:u_j | 1:u_j; 2:u_i \rangle)^* = \delta_{ij} \delta_{ji} \end{aligned}$$

also $\hat{P}_{21} = \hat{P}_{21}^\dagger \rightarrow \hat{P}_{21}$ ist hermitisch. Damit sind die Eigenwerte von \hat{P}_{21} reell.

Da $\hat{P}_{21}^2 = \hat{1} \rightarrow$ Die Eigenwerte erfüllen $\lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1$

* Die Eigenwerte sind also:

$\hat{P}_{21} |\psi_S\rangle = +|\psi_S\rangle \rightarrow |\psi_S\rangle$ ist symmetrisch

$\hat{P}_{21} |\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle \rightarrow |\psi_A\rangle$ ist antisymmetrisch

* Wir können nun die sogen. Symmetrisierungsoperator (\hat{S}) und Antisymmetrisierungsoperator (\hat{A}) einführen:

$$\hat{S} = \frac{1}{2} (\hat{1} + \hat{P}_{21})$$

$$\hat{A} = \frac{1}{2} (\hat{1} - \hat{P}_{21})$$

Die erfüllen: $\hat{S}^2 = \hat{A}^2 = \hat{1}$

$$\hat{S}^+ = \hat{S}$$

$$\hat{A}^+ = \hat{A}$$

$$\hat{S}\hat{A} = \hat{A}\hat{S} = 0$$

$$\hat{S} + \hat{A} = \hat{1}$$

* Für einen beliebigen Vektor $|1\rangle$ wir können ein symmetrischer Vektor ($\hat{S}|1\rangle$) und ein antisymmetrischer Vektor ($\hat{A}|1\rangle$) bauen:

DAS SYMMETRISIERUNGSPOSTULAT

- Das Symmetrisierungspostulat beschränkt die möglichen physikalischen Zustände eines Systems von identischen Teilchen.
- Die physikalischen Vektoren sind je nach der Natur der identischen Teilchen entweder total symmetrisch oder total antisymmetrisch in Bezug auf die Permutationen dieser Teilchen:
 - Sind die physikalischen Vektoren symmetrisch, so heißen die Teilchen BOSONEN, sind sie antisymmetrisch, so nennt man sie FERMIONEN.

* Dieses Postulat teilt die in der Natur existierende Teilchen in 2 Kategorien:

- BOSONEN: Teilchen mit ganzzahligen Spin (z.B. Photon)
- FERMIONEN: Teilchen mit halbzahligen Spin (z.B. Elektron)

(Bemerkung: die Verbindung zwischen Spin und Boson/Fermion
Natur ist eigentlich empirisch.)

Das Symmetrieverzugsprinzip hebt die Schwierigkeiten der Austauschentartung auf.

Nehmen wir 2 identische Teilchen. Ein Teilchen befindet sich in den Zustand $|f\rangle$, und das andere in $|x\rangle$.
① Das Teilchen in $|f\rangle$ erhält z.B. die Nummer 1, und das Teilchen in $|x\rangle$ die Nummer 2.

$$|U\rangle = |1:f; 2:x\rangle$$

② Sind die Teilchen Bosonen, so symmetrisieren wir $|U\rangle$:

$$\hat{S}|U\rangle = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \hat{P}_{12})|U\rangle = \frac{1}{2}[|1:f; 2:x\rangle + |1:x; 2:f\rangle]$$

Sind die Fermionen, so antisymmetrisieren wir $|U\rangle$:

$$\hat{A}|U\rangle = \frac{1}{2}(\mathbb{1} - \hat{P}_{12})|U\rangle = \frac{1}{2}[|1:f; 2:x\rangle - |1:x; 2:f\rangle]$$

③ Wir nummerieren die Vektoren:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[|1:f; 2:x\rangle + \epsilon|1:x; 2:f\rangle]$$

$$\epsilon = \begin{cases} +1 & \rightarrow \text{Bosonen} \\ -1 & \rightarrow \text{Fermionen} \end{cases}$$

Diese sind die nummierte physikalische Zustände.

* fehlen wir nun, was passiert wenn $\chi = \phi$.

Für Bosonen erhalten wir als normierte physikalische Zustand, einfach $|1:\ell; 2:\ell\rangle$, das ist sowieso schon symmetrisch.

• Aler für Fermionen etwas bemerkenswerter passiert.

$$\hat{A} |1:\ell; 2:\ell\rangle = \frac{1}{2} (|1:\ell; 2:\ell\rangle - |1:\ell; 2:\ell\rangle) = 0$$

Es gibt also keinen physikalischen Vektor, der den Zustand von 2 Fermionen beschreiben kann, die sich im selben Einzelzustand $|\ell\rangle$ befinden.

Zwei identische Fermionen können nicht im selben Einzelzustand sein \implies PAULISCHE AUSSCHLIEßUNGSPRINZIP
 (oder einfache PAULI-PRINZIP)

Diesen Prinzip hat weitreichende physikalische Konsequenzen.

• VERALLGEMEINERUNG FÜR MEHRERE TEILCHEN

Die Schwierigkeiten im Zusammenhang mit der Austauschentartung treten bei der Untersuchung aller Systeme auf, die eine beliebige Anzahl $N > 1$ identischer Teilchen enthalten.

z.B. nehmen wir $N=3$

Nehmen wir den Operator \hat{B} mit Eigenzustände $|b_n\rangle$ und Eigenwerte b_n ($n=1, 2, 3, \dots$)

Die drei-Teilchen-Zustände sind der Form:

$|1:b_i; 2:b_j; 3:b_k\rangle$ wobei $i, j, k = 1, 2, 3, \dots$

Wir messen z.B. Eine solche Messung ergibt 3 unterschiedliche Ergebnisse b_n, b_p und b_q . Dann tritt noch mal Austausch-entartung auf, da der Zustand des Systems nach der Messung a priori durch einen beliebigen Vektor des Unterraums gegeben werden kann, der durch die folgenden sechs Basisvektoren aufgespannt wird:

$|1:b_n; 2:b_p; 3:b_q\rangle, |1:b_q; 2:b_n; 3:b_p\rangle, |1:b_p; 2:b_q; 3:b_n\rangle$

$|1:b_n; 2:b_q; 3:b_p\rangle, |1:b_p; 2:b_n; 3:b_q\rangle, |1:b_q; 2:b_p; 3:b_n\rangle$

Auso es ist nicht möglich, durch eine vollständige Messung an jedem Teilchen einen eindeutigen Ketvektor aus dem Zustandsraum des Systems zu erhalten.

Permutationsoperatoren für $N \geq 2$

- Sei $N=3$
- Für 3 Elementen haben wir 6 mögliche Permutationen
 $\hat{P}_{123}, \hat{P}_{312}, \hat{P}_{231}, \hat{P}_{132}, \hat{P}_{213}$ und \hat{P}_{321}
- $\hat{P}_{npg} | 1: u_i; 2: u_j; 3: u_k \rangle = | n: u_i; p: u_j; q: u_k \rangle$

z.B.

$$\begin{aligned}\hat{P}_{231} | 1: u_i; 2: u_j; 3: u_k \rangle &= | 2: u_i; 3: u_j; 1: u_k \rangle \\ &= | 1: u_k; 2: u_i; 3: u_j \rangle\end{aligned}$$

- Für größere N hat man $N!$ Permutationen, die genau entsprechend sich definieren lassen.
- Die Permutation erfüllen verschiedene Eigenschaften:
 - * Die Permutation erfüllen verschiedene Eigenschaften:
 - * $\hat{P}_{123} = \text{Einheitsoperator}$
 - * Das Produkt 2 Permutationen ist eine Permutation
 z.B. $\hat{P}_{312} \hat{P}_{321} = \hat{P}_{321}$
 - * Permutationsoperatoren kommutieren nicht miteinander
 z.B. $\hat{P}_{312} \hat{P}_{132} = \hat{P}_{321}$
 $\hat{P}_{132} \hat{P}_{312} = \hat{P}_{213}$
 - * Eine Transposition ist eine Permutation, bei der nur 2 Teileien vertauscht werden.
 z.B. \hat{P}_{213}

(158)

Jeder Permutationsoperator kann in ein Produkt von Transpositionen zerlegt werden

$$\text{z.B. } \hat{P}_{312} = \hat{P}_{132} \hat{P}_{213} \quad \left. \begin{array}{l} \\ = \hat{P}_{213} \hat{P}_{321} \end{array} \right\} \text{Diese Zerlegung ist nicht eindeutig.}$$

Was wichtig ist, ist daß die Anzahl der Permutationen die Hälfte der Anzahl an Transpositionen ist.

$$\text{z.B. } \hat{P}_{312} \Rightarrow 2 \text{ Transpositionen} \Rightarrow \text{gerade}$$

- * Da die Permutationsoperatoren für $N > 2$ nicht kommutieren, ist es nicht möglich, eine Basis aus gemeinsamen Eigenvektoren zu konstruieren. Aber es gibt bestimmte Vektoren, die gemeinsame Eigenwerte aller Permutationsoperatoren sind:

$$\hat{P}_\alpha |\Psi_S\rangle = |\Psi_S\rangle \quad \text{für alle Permutation } P_\alpha$$

→ heißt total symmetrisch.

$$\hat{P}_\alpha |\Psi_A\rangle = \varepsilon_\alpha |\Psi_A\rangle \quad \left\{ \begin{array}{ll} \varepsilon_\alpha = 1 & \text{für gerade } P_\alpha \\ \varepsilon_\alpha = -1 & \text{für ungerade } P_\alpha \end{array} \right\}$$

- * Wir können wie für $N=2$ die Symmetriozus- bzw. Antisymmetriozusoperatoren ~~ausführen~~ einführen:

$$\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \hat{P}_\alpha$$

$$\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_\alpha \hat{P}_\alpha$$

* Man kann relativ einfach zeigen, daß:

- $\hat{S}^+ = \hat{S}$
- $\hat{A}^+ = \hat{A}$
- $\hat{S}^2 = \hat{S}$
- $\hat{A}^2 = \hat{A}$
- $\hat{A}\hat{S} = \hat{S}\hat{A} = 0$

- * Das Symmetriepostulat gilt nun wie für 2 Teilchen.
Die physikalischen Vektoren sind entweder total symmetrisch (Bosonen) oder total antisymmetrisch (Fermionen).
- * Nehmen wir $N=3$

① Bosonen

$$|U\rangle = |1:\ell; 2:x; 3:w\rangle + |1:w; 2:\ell; 3:x\rangle + |1:x; 2:w; 3:\ell\rangle + |1:w; 2:x; 3:\ell\rangle$$

$$\hat{S}|U\rangle = \frac{1}{3!} \sum P_{\sigma} |U\rangle = \frac{1}{6} \left\{ |1:\ell; 2:x; 3:w\rangle + |1:w; 2:\ell; 3:x\rangle + |1:x; 2:w; 3:\ell\rangle + |1:w; 2:x; 3:\ell\rangle \right\}$$

Diesen Vektor müssen wir nun normieren.

Wenn $|\ell\rangle$, $|x\rangle$ und $|w\rangle$ orthogonal sind, dann:

$$\hat{S}|U\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{6}} \left\{ |1:\ell; 2:x; 3:w\rangle + |1:w; 2:\ell; 3:x\rangle + |1:x; 2:w; 3:\ell\rangle \right\}$$

Wenn $|\ell\rangle = |x\rangle$:

$$\hat{S}|U\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{3}} \left[|1:\ell; 2:\ell; 3:w\rangle + |1:\ell; 2:w; 3:\ell\rangle + |1:w; 2:\ell; 3:\ell\rangle \right]$$

② Fermionen

$$\hat{A}_{111} = \frac{1}{3!} \sum_{\sigma} \epsilon_{\sigma} \hat{P} |1; \ell_1; 2; x_1; 3; w_1\rangle$$

Die Vorzeichen der verschiedenen Terme der Summe gehorchen derselben Regel, die auch bei der Bedeutung einer 3×3 -Determinante Anwendung findet. Also:

$$\hat{A}_{111} = \frac{1}{3!} \begin{vmatrix} |1; \ell_1\rangle & |1; x_1\rangle & |1; w_1\rangle \\ |2; \ell_2\rangle & |2; x_2\rangle & |2; w_2\rangle \\ |3; \ell_3\rangle & |3; x_3\rangle & |3; w_3\rangle \end{vmatrix} = \frac{\text{SLATER - DETERMINANTE}}{3!}$$

Es ist klar, dass $\hat{A}_{111} = 0$, wenn 2 der Einzeltastände $|\ell_i\rangle$, $|x_i\rangle$ oder $|w_i\rangle$ übereinstimmen. Wir finden also wieder das Pauli-Prinzip.

Für die Normierung müssen wir nur $\frac{1}{3!}$ durch $\frac{1}{N!}$ zu ersetzen.

- Für $N > 3$ ist die Verallgemeinerung klar (z.B. wir machen ein $N \times N$ Slater-Determinant).
- Die Physik für Bosonen und Fermionen ist ganz verschieden. Die Analyse dieser Physik ist eigentlich ^{am} eigentliche Quantenstatistische Physik, die ihr nächstes Semester sehen wird.