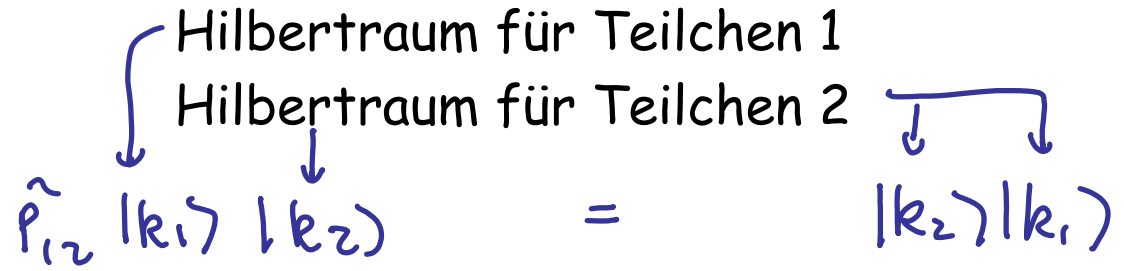


Zusammenfassung: Identische Teilchen

Definition:
Permutations-
operator:



\hat{A}_1, \hat{A}_2 seien diesselben
Observablen \hat{A} für
Teilchen 1, 2:

$$\begin{Bmatrix} \hat{A}_1 \\ \hat{A}_2 \end{Bmatrix} |a'\rangle |a''\rangle = \begin{Bmatrix} a'' \\ a' \end{Bmatrix} |a'\rangle |a''\rangle$$

$$\hat{P}_{12} \hat{A}_1 \hat{P}_{12}^{-1} = \hat{A}_2$$

Symmetrisierungs-
Postulat:

$$\hat{P}_{ij} |N \text{ identische Bosonen}\rangle = + |N \text{ identische Bosonen}\rangle \quad (\text{Id 7.1})$$

$$\hat{P}_{ij} |N \text{ identische Fermionen}\rangle = - |N \text{ identische Fermionen}\rangle$$

Spin-Statistik-
Theorem:

Teilchen mit ganzzahligem Spin sind Bosonen
Teilchen mit halbganzzahligem Spin sind Fermionen

Pauli-Prinzip:

In einem System identischer Fermionen können sich nicht gleichzeitig zwei (oder mehr) Fermionen in ein und demselben Zustand befinden.

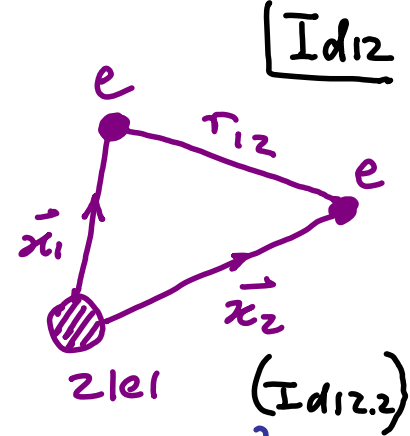
$$\psi_{k(x)} = \langle x | k \rangle$$

$$\langle \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N | \hat{A} | k_1, k_2, \dots, k_N \rangle = \det \begin{pmatrix} \psi_{k_1}^{(1)} & \dots & \psi_{k_1}^{(N)} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \psi_{k_N}^{(1)} & \dots & \psi_{k_N}^{(N)} \end{pmatrix}$$

6.4 Helium-Atom

Hamilton:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - ze^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (\text{Id}12.1)$$



Ignoriere zunächst die e-e WW: eine Klasse v. WFnen:

$$\phi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_{100}(x_1) \psi_{nlm}(x_2) \pm \psi_{nlm}(x_1) \psi_{100}(x_2) \right] \chi_{s/t} \quad (\text{Id}12.2)$$

Wasserstoff-WF: ↗

Spin Singulett/Triplett

Grundzustand: $(1s)^2$

Orbitale WF symmetrisch,
Spin Singulett:

$$\phi_g(x_1, x_2) = \psi_{100}(x_1) \psi_{100}(x_2) \chi_s = \frac{z^3}{\pi a_0^3} e^{-z \frac{(r_1+r_2)}{a_0}} \quad (z=2) \quad (\text{Id}12.3)$$

$2 \times (E_g)_{\text{Wasserstoff}}$

$$E_g = 2 \cdot 4 \left(-\frac{e^2}{2a_0} \right) =$$

30 % zu groß im Vergleich zum Experiment :

Betrachte ee-WW störungstheoretisch:

$$\Delta_{(1s)^2} = \left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle$$

(Für Details, siehe Sakurai)

$$= \left(\frac{5}{2} \right) \left(\frac{e^2}{2a_0} \right)$$

$$E_{\text{theor}} = E_g + \Delta_{(1s)^2} = -74.8 \text{ eV} \quad , \quad E_{\text{exp}} = -78.8 \text{ eV}$$

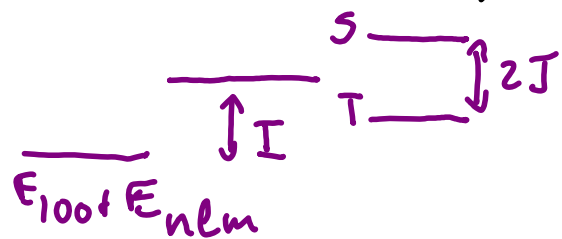
VariationsWF, um "Abschirmung" zu berücksichtigen:

Energie-Erwartungswert:

Minimiere $\langle H \rangle$:

$$\partial_{z_{\text{eff}}} \langle H \rangle = 0$$

Angeregte Zustände der Form $(1s)(n\ell)$:



Singlett: Parahelium

Triplett: Orthohelium

$$\langle x_1, x_2 | \tilde{0} \rangle = \frac{z_{\text{eff}}^3}{\pi a_0^3} e^{-z_{\text{eff}}(r_1 + r_2)/a_0} \quad \text{[Id 13]} \quad \text{(Id 13.1)}$$

Elektron 1 sieht effektive Kernladung $z_{\text{eff}} (< 2)$, weil Elektron 2 den Kern ein wenig "abschirmt".

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \langle \tilde{0} | \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} | \tilde{0} \rangle - \langle \tilde{0} | \frac{ze^2}{r_1} + \frac{ze^2}{r_2} | \tilde{0} \rangle + \langle \tilde{0} | \frac{e^2}{r_{12}} | \tilde{0} \rangle \\ &= \left(2 \frac{z_{\text{eff}}^2}{2} - 2z z_{\text{eff}} + \frac{5}{8} z_{\text{eff}} \right) \frac{e^2}{a_0} \quad \text{(Id 13.2)} \end{aligned}$$

$$z_{\text{eff}} = 2 - \frac{5}{16}, \quad E_{\text{var}} = -77.5 \text{ eV}, \quad E_{\text{exp}} = -78.8 \text{ eV} \quad \text{(nicht schlecht!)}$$

$$E = E_{100} + E_{n\ell m} + \Delta E \quad \text{(Störungstheorie in } \frac{e^2}{r_{12}} \text{)}$$

$$\Delta E = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 \langle \psi_{100} | \langle \psi_{n\ell m} | \pm \langle \psi_{n\ell m} | \langle \psi_{100} | \frac{e^2}{r_{12}} \left[| \psi_{100} \rangle | \psi_{n\ell m} \rangle \pm | \psi_{n\ell m} \rangle | \psi_{100} \rangle \right]$$

$$I = \int d^3x_1 \int d^3x_2 |\psi_{100}(x_1)|^2 |\psi_{n\ell m}(x_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} \quad \text{1.3 + 2.4}$$

$$J = \int d^3x_1 \int d^3x_2 \psi_{100}^*(x_1) \psi_{n\ell m}^*(x_2) \psi_{n\ell m}(x_1) \psi_{100}(x_2) \frac{e^2}{r_{12}} \quad \text{1.4 + 2.3}$$

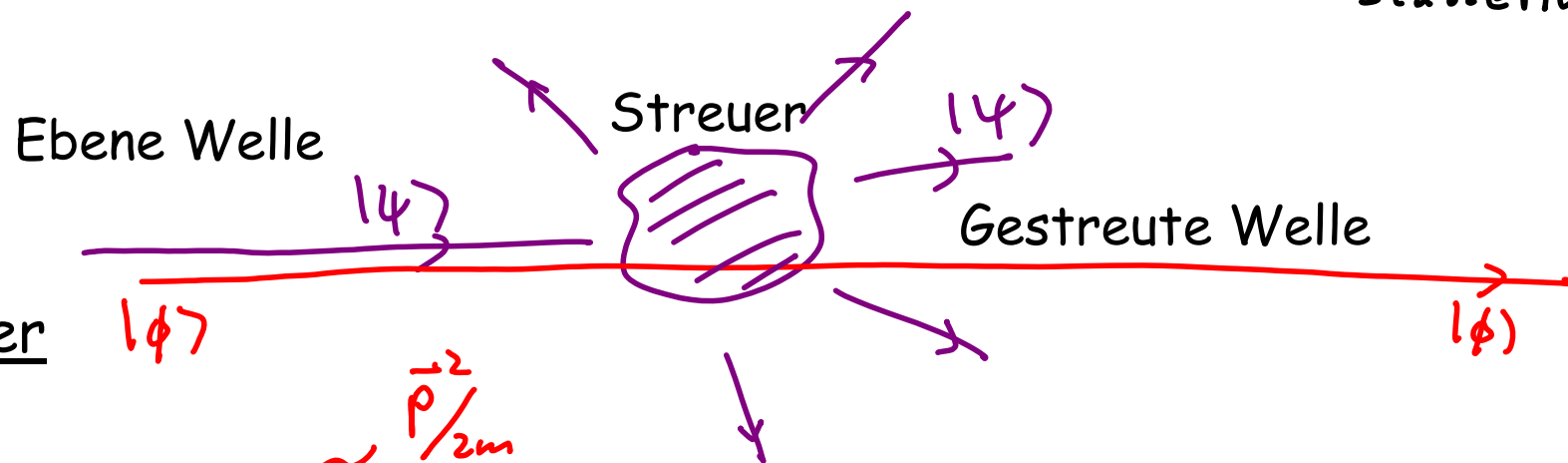
Warum liegt
Singulett höher als
Triplett?

Für symmetrischer WF sind sich die Elektron im Mittel etwas näher als für antisymmetrische, deswegen ist die abstossende Wirkung des ee-WW-Terms grösser!

Fazit: Obwohl der Hamilton völlig spinunabhängig ist, zeigen alle Eigenenergien eine Singulett-Triplett-Aufspaltung, rein aufgrund der Fermi-Dirac-Statistik! (Heisenberg)

7. Streutheorie (Sakurai, Kapitel 7; siehe auch Griffiths, Kapitel 11)

ScI
"Scattering"



7.1 Lippmann-Schwinger Gleichung

Hamilton:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \leftarrow \text{Streupotential} \quad (\text{ScI.1})$$

Freie (ungestrente) Zustände [ebene Wellen, oder radial-Wellen]:

$$\hat{H}_0 |\phi\rangle = E |\phi\rangle \quad (\text{ScI.2})$$

Annahme: Streuung ist elastisch. Gesucht:

Lösung der vollen Schrödinger-Gl. mit derselben Energie E wie ungestörter, "einfallender" Zustand.

Volle Schrödinger-Gl:

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (\text{ScI.3})$$

$$\text{Für } V \rightarrow 0, \text{ muss also auch } |\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle \quad (\text{ScI.4})$$

Lösungsansatz:

$$\frac{1}{E - \hat{A}} = \frac{1}{E(1 - \hat{A}/E)}$$

Check: $= \frac{1}{E} (1 + \frac{\hat{A}}{E} + \frac{\hat{A}^2}{E^2} + \dots)$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V} |\psi\rangle + |\phi\rangle \quad (Sc2.1)$$

$$(E - \hat{H}_0) |\psi\rangle = \hat{V} |\psi\rangle + \underbrace{(E - \hat{H}_0) |\phi\rangle}_{=0} \quad (Sc2.2)$$

Aber: Regularisierungs-Vorschrift nötig für singulären Operator:

$$(\hat{V} \rightarrow e^{\pm i\eta} \hat{V})$$

Wir werden sehen:

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\eta} \hat{V} |\psi^{(\pm)}\rangle + |\phi\rangle \quad (Sc2.2)$$

Lippmann-Schwinger-Gl.

$|\psi^{(\pm)}\rangle$ entspricht einem Streuprozess mit $|\psi^{(\pm)}\rangle \xrightarrow{t \rightarrow \mp\infty} |\phi\rangle$

LS-Gl. in Ortsdarstellung:

$$\langle \vec{x}_1 | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \vec{x}_1 | \phi \rangle + \int d\vec{x}_2 \underbrace{\langle \vec{x}_1 | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\eta} | \vec{x}_2 \rangle}_{G^{\pm}(\vec{x}_1, \vec{x}_2)} \langle \vec{x}_2 | \hat{V} | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (Sc2.3)$$

$$\langle \vec{x}_1 | \phi \rangle = \frac{e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}_1 / \hbar}}{(2\pi \hbar)^{3/2}} \quad (Sc2.4)$$

$|\phi\rangle = |\vec{p}\rangle$
sei ebene Welle:

Normierung:

$$\langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle = \int d^3 \vec{x} \langle \vec{p}' | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = \left(\frac{1}{2\pi \hbar}\right)^3 \int d\vec{v} e^{-i(\vec{p}' - \vec{p}) \cdot \vec{x} / \hbar} = \delta^{(3)}(\vec{p}' - \vec{p}) \quad (Sc2.4)$$

LS-Gl. in
Impulsbasis:

$$\langle \vec{p}' | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \vec{p}' | \phi \rangle + \frac{\langle \vec{p}' | \hat{V} | \psi^{(\pm)} \rangle}{E - \hat{H}_0 \frac{p'^2}{2m} \pm i\eta} \quad \text{(Sc3.1)}$$

Integralkern in (Sc2.3)
"Greensche Funktion":

$$G_{\pm}^{(E)}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \langle \vec{x}_1 | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\eta} | \vec{x}_2 \rangle \quad \text{(Sc3.2)}$$

wird im folgenden
gezeigt werden:

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{x}_{12}|}}{|\vec{x}_{12}|} \quad \left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \quad \text{(Sc3.3)}$$

$$\vec{x}_{12} \equiv \vec{x}_1 - \vec{x}_2$$

Einschub von p-
Vollständigkeit,
da H im p-Raum
diagonal ist:

$$G_{\pm}^{(1,2)} = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 p' \int d^3 p \underbrace{\langle \vec{x}_1 | \vec{p}' \rangle}_{e^{i\vec{p}' \cdot \vec{x}_1 / \hbar}} \underbrace{\langle \vec{p}' | \frac{1}{E - \frac{p'^2}{2m} \pm i\eta} | \vec{p} \rangle}_{\delta^3(\vec{p} - \vec{p}')} \underbrace{\langle \vec{p} | \vec{x}_2 \rangle}_{\frac{e^{-i\vec{p} \cdot \vec{x}_2 / \hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}} \quad \text{(Sc2.4)}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}_{12} / \hbar}}{E - p^2 / 2m \pm i\eta} \quad \text{(Sc3.5)}$$

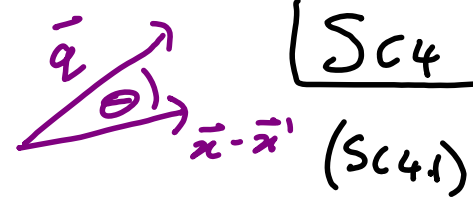
Sei:

$$x_{12} \equiv |\vec{x}_{12}|$$

$$q \equiv |\vec{q}| \quad G_{\pm}^{(1,2)}$$

$$\tilde{q} = \frac{zm}{\hbar^2} q$$

$$E = k^2 \hbar^2 / 2m, \quad \vec{p} = \hbar \vec{q}$$



$$= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_0^{\infty} dq q^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta)$$

$$\frac{\vec{p} \cdot \vec{x}_{12}}{\hbar} = q x_{12} \cos\theta$$

$$\frac{e^{i q x_{12} (\cos\theta)}}{\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - q^2 \pm i\eta)}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} dq q \frac{e^{i q x_{12}} - e^{-i q x_{12}}}{k^2 - q^2 \pm i\eta}$$

$$\frac{e^{i q x_{12}}}{i q x_{12}} - \frac{e^{-i q x_{12}}}{i q x_{12}} \quad (SC4.2)$$

$$q = \begin{matrix} + \\ (-) \end{matrix} \sqrt{k^2 \pm i\eta} = \begin{matrix} + \\ (-) \end{matrix} k \sqrt{1 \pm (i\eta/k^2)} = \begin{matrix} + \\ (-) \end{matrix} (k \pm i\eta)$$

SC4.3)

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{q \left[e^{i q x_{12}} - e^{-i q x_{12}} \right]}{(q - q_1^{(\pm)})(q - q_2^{(\pm)}) i |x_{12}|}$$

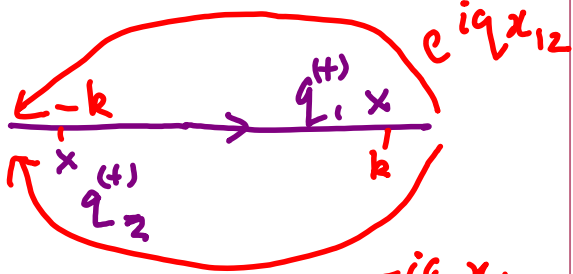
(SC4.4)

Kontour-Integral,
mit Polen bei:

$$\begin{cases} q_1^{(+)} \\ q_2^{(+)} \end{cases} \equiv \pm (k + i\eta)$$

$$\begin{cases} q_1^{(-)} \\ q_2^{(-)} \end{cases} \equiv \pm (k - i\eta)$$

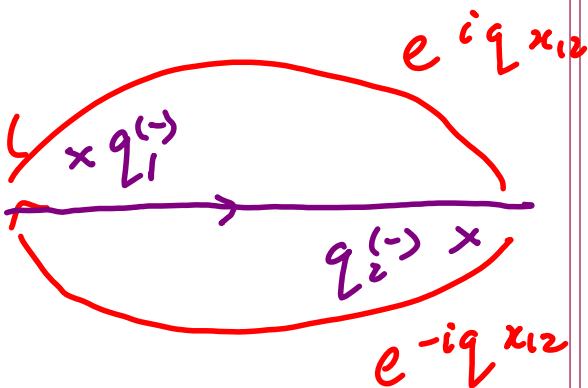
Oberes Vorzeichen:



$$G_{(1,2)}^{(\pm)} = \frac{-1}{(i8\pi^2) |x_{12}|} \left[\frac{q_1^{(\pm)} e^{i q_1^{(\pm)} x_{12}}}{q_1^{(\pm)} - q_2^{(\pm)}} - (-) \frac{q_2^{(\pm)} e^{-i q_2^{(\pm)} x_{12}}}{q_2^{(\pm)} - q_1^{(\pm)}} \right] \quad \text{Sc 5}$$

$(q = -iR: e^{-Rx_{12}} \rightarrow 0)$

Unteres Vorzeichen:



$$G_{(1,2)}^{(\pm)} = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|x_{12}|} \left[\frac{\cancel{+k} e^{\pm ik x_{12}}}{\cancel{\neq 2k}} - (-) \frac{\cancel{(-k)} e^{\pm ik x_{12}}}{\cancel{(\neq 2k)}} \right]$$

$$G_{(1,2)}^{(\pm)} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik x_{12}}}{x_{12}}$$

(Sc 5.1)

(Sc 5.2)

Nebenbemerkung:
G ist Greensche
Funktion der
"Helmholtz"-Gl.

$$\left. \begin{aligned} (\vec{\nabla}_1^2 + k^2) G^{\pm}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) &= \delta^{(3)}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \\ \text{denn: } -\vec{\nabla}^2 \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|x_{12}|} &= \delta^{(3)}(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \end{aligned} \right\} \quad \text{(Sc 5.3)}$$

(Sc5.1) in (Sc2.4)

$$\langle \vec{x}_1 | \psi^\pm \rangle = \langle \vec{x}_1 | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d\vec{x}_2 \frac{e^{\pm i k x_{12}}}{4\pi x_{12}} \langle \vec{x}_2 | V | \psi^\pm \rangle$$

SC6

Betrachte lokales
Potential:

$$\langle \vec{x}_2 | \hat{V} | \vec{x}_3 \rangle = V(\vec{x}_2) \delta^{(3)}(\vec{x}_2 - \vec{x}_3) \int d^3x |x_3\rangle \langle x_3|$$

$$\langle \vec{x}_1 | \psi^\pm \rangle = \langle \vec{x}_1 | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d\vec{x}_2 \frac{e^{\pm i k x_{12}}}{4\pi x_{12}} V(\vec{x}_2) \langle \vec{x}_2 | \psi^\pm \rangle$$

$e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}_1} / (2\pi \hbar)^{3/2}$ $\frac{1}{r_1}$ (Sc6.2)

$r_1 = |\vec{x}_1|$, $r_2 = |\vec{x}_2|$

Annahme: $|\vec{x}_1| \gg |\vec{x}_2|$

$$x_{12} = \left[r_1^2 - 2 r_1 r_2 \cos \alpha + r_2^2 \right]^{1/2}$$

$$= r_1 \left[1 - 2 \frac{r_2}{r_1} \cos \alpha + \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^2 \right]^{1/2}$$

$\approx r_1 - \hat{x}_1 \cdot \vec{x}_2$ (Sc6.3)

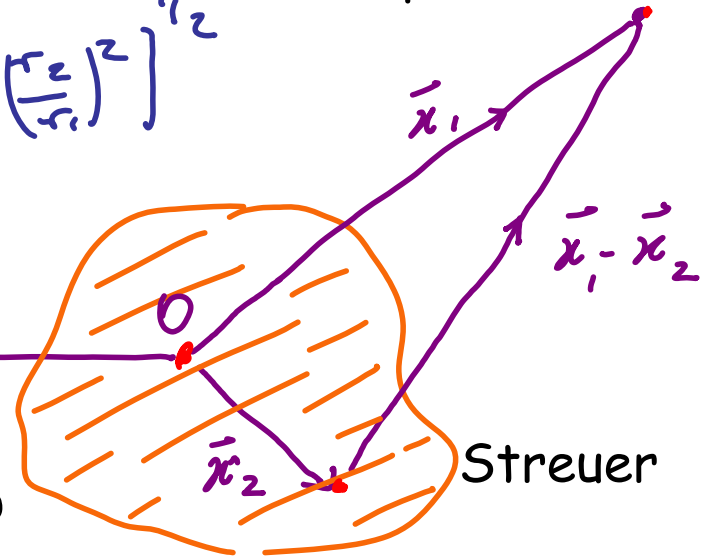
$\approx r_1$

$\vec{x}_1 = \frac{\vec{x}_1}{r_1}$

$\vec{k} = \vec{p} / \hbar$

Einfallende ebene Welle, mit Impuls p

Beobachtungspunkt P



Streuer

$$\vec{k}' = k \hat{x}_1$$

$$e^{\pm i k x_{12}} \stackrel{(Sc6.3)}{\approx} e^{\pm i k (r_1 - \hat{x}_1 \cdot \vec{x}_2)} = e^{\pm i k r_1} e^{\mp i \vec{k}' \cdot \vec{x}_2} \quad \boxed{\text{Sc7}} \quad (Sc7.1)$$

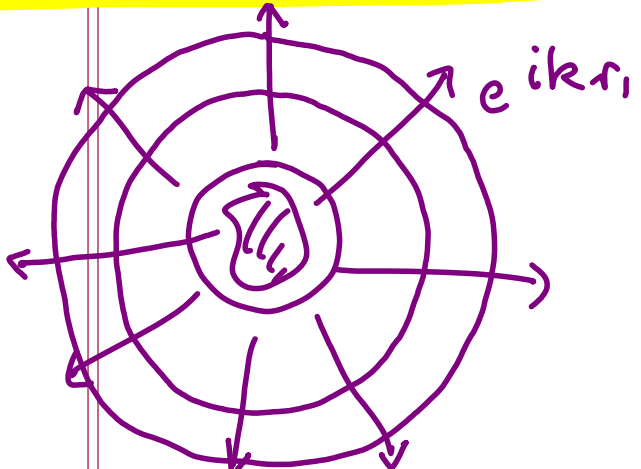
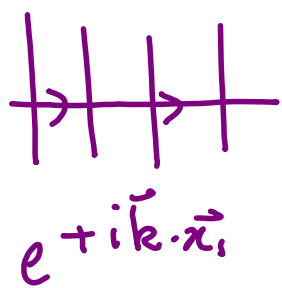
$$(Sc6.2): \langle \vec{x}_1 | \psi^{(\pm)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}_1} + \frac{e^{\pm i k r_1}}{r_1} \int d\vec{x}_2 \left(\mp \frac{2m}{\hbar^2} \frac{(2\pi)^3}{4\pi} \right) \frac{e^{\mp i \vec{k}' \cdot \vec{x}_2}}{(2\pi)^{3/2}} V(\vec{x}_2) \langle \vec{x}_2 | \psi^{(\pm)} \rangle \right]$$

$$\downarrow f(\vec{k}, \pm \vec{k}')$$

$$= \frac{2m}{\hbar^2} 2\pi^2 \langle \pm \vec{k}' | \hat{V} | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (Sc7.2)$$

$$\langle \vec{x}_1 | \psi^{(\pm)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}_1} + \frac{e^{\pm i k r_1}}{r_1} f(\vec{k}, \pm \vec{k}') \right]$$

radial aus/einlaufende Welle! (Sc7.3)



"Streu-Amplitude"

Differentieller Streuquerschnitt:

(beliebte
Notation)

Diff. Streuquerschnitt
 $I(\theta)$ ist Proportionalitätsfaktor
zwischen $d\sigma$, $d\Omega$

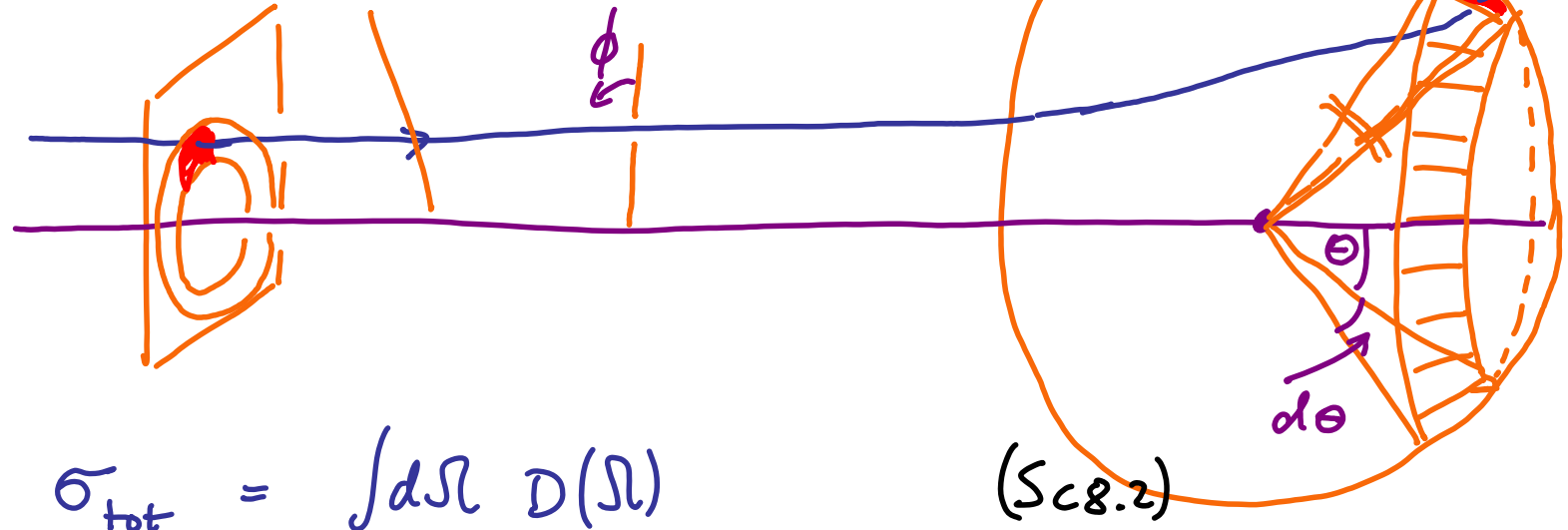
Gestamtstreu-
querschnitt:

Wahrscheinlichkeit pro Zeit,
dass einfallendes Teilchen auf
Flächenelement $d\sigma$ trifft.

Wahrscheinlichkeit pro Zeit,
dass dieses Teilchen in den Raumwinkel
gestreut wird $d\Omega$

Streu-Amplitude,
ausgedrückt durch
messbare Größen:

$$d\sigma = D(\Omega) d\Omega \quad (\text{Sc 8.1})$$



$$\sigma_{\text{tot}} = \int d\Omega D(\Omega)$$

$$dP = |j_{\text{einfallend}}| \cdot d\sigma$$

$$dP = |j_{\text{gestreut}}| \cdot r^2 d\Omega$$

$$D(\Omega) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{---}}{\text{---}} = \text{---} \quad (\text{Sc 7.3})$$