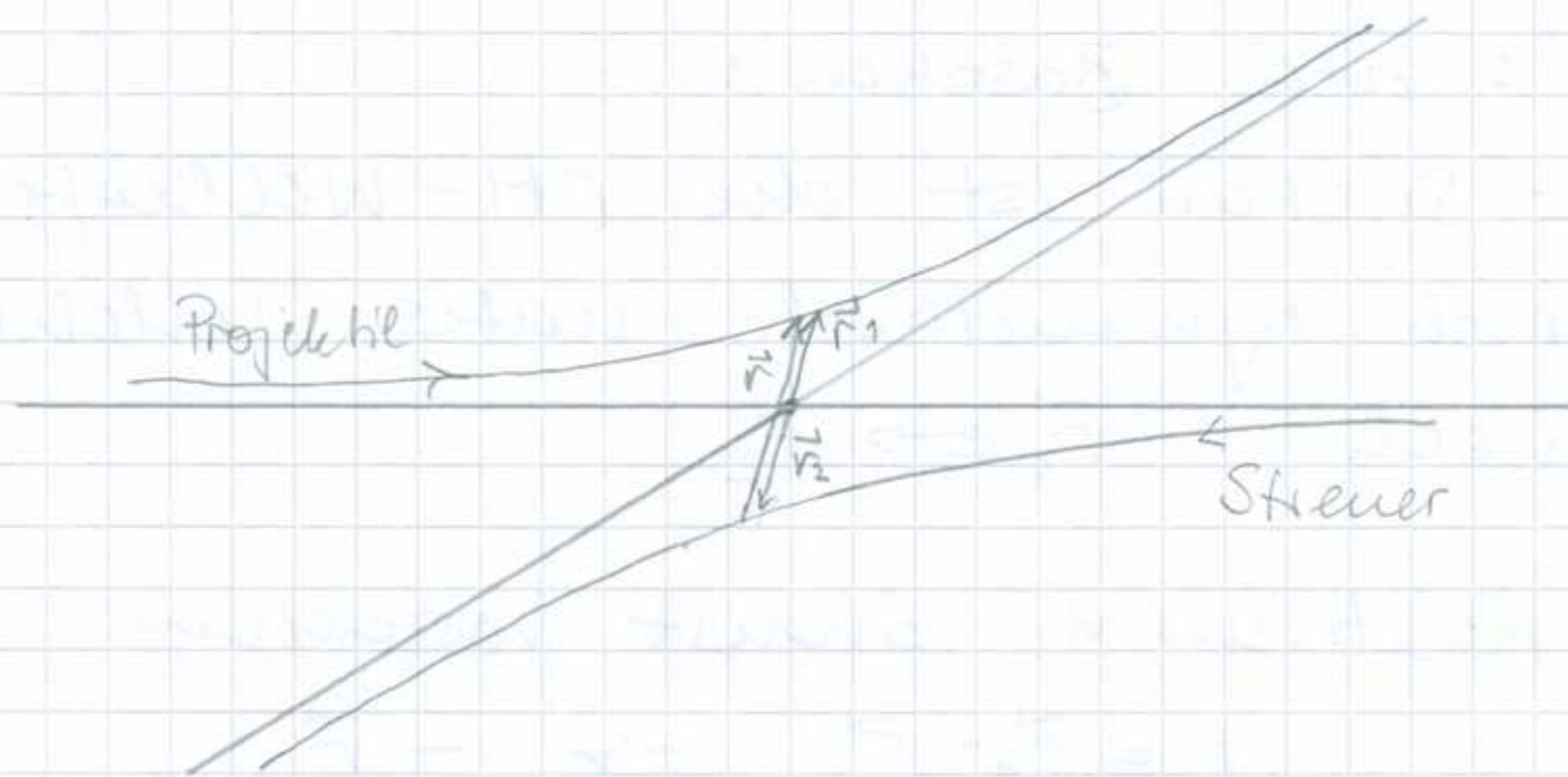


weiter betrachtet zu werden

49

- Im CM-System ist $\vec{v}_1 \parallel \vec{r}$:



Daher: Wahrsch, dass Projektile in $d\Omega$ (im CM-System) festlegt gleich Wahrsch, dass Pseudoteilchen mit Koord. \vec{r} in $d\Omega$ festlegt.

→ Es reicht aus, Schrödingers-Gl. für Relativbewegung zu lösen.

→ Gleichungen wie vorher, allerdings m durch reduzierte Masse

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

zu ersetzen.

→ Transformation ins Laborsystem
(→ Übung)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_L} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{d\Omega}{d\Omega_L}$$

- Wir betrachten nun die Streuung identischer Teilchen

- Beispiel: zwei Bosonen:

Im CM-System ist die CM-Wellenfunktion automatisch symmetrisch unter Teilchenaustausch $\vec{r}_1 \leftrightarrow \vec{r}_2$

Abs: Relativbord. ändert Vorzeichen

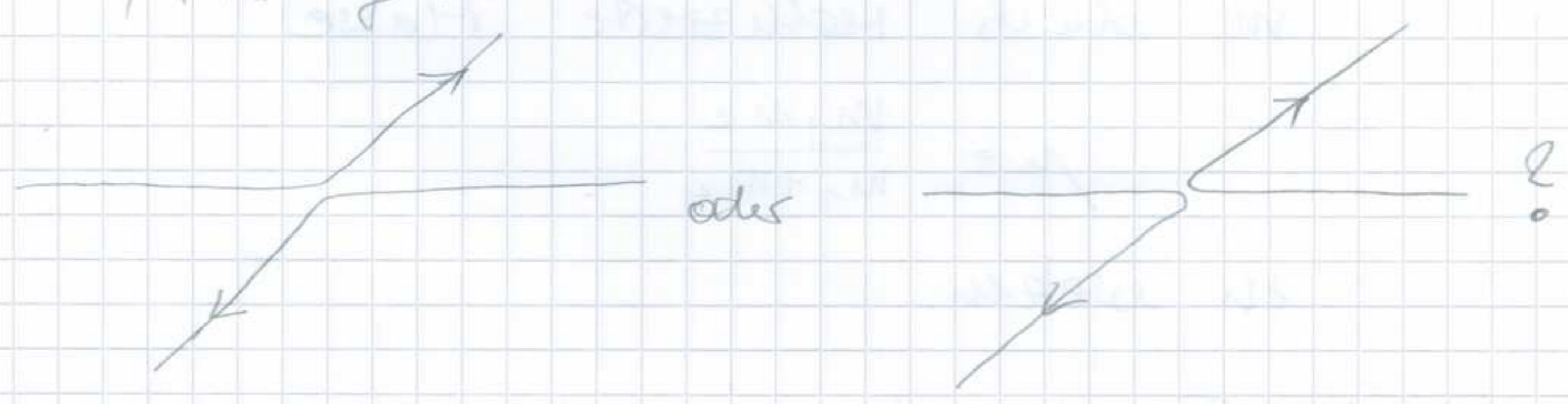
$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \rightarrow -\vec{r}$$

- Symmetrisierung:

$$\psi_{\text{sym}}(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (e^{ikz} + e^{-ikz}) + \left[f_k(\vartheta, \varphi) + f_k(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) \right] \frac{e^{ikr}}{r}$$

$\nwarrow \quad \nearrow$
 $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$

- Man kann bei identischen Teilchen nicht sagen, welches nach ϑ, φ und welches nach $\pi - \vartheta, \varphi + \pi$ gestreut wurde:



- Daher: Interferenz

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\vartheta, \varphi) + f_k(\pi - \vartheta, \varphi + \pi)|^2 \quad (\text{II 33})$$
$$= |f_k(\vartheta, \varphi)|^2 + |f_k(\pi - \vartheta, \varphi + \pi)|^2 + 2 \operatorname{Re} \left[f_k(\vartheta, \varphi) \cdot f_k^*(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) \right]$$

- Wir hatten für das Coulomb-Potential 51
den korrekten diff. Wirkungsweg

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{corr}} = \frac{(Ze^2)^2}{16 E^2 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}} \quad \text{als Grenzfall } \mu \rightarrow 0 \text{ des Yukawa-Potentials}$$

erhalten (s. (II 9)), obwohl die Streuamplitude nicht den korrekten Phasenfaktor besaß.

In (II 10) wurde die korrekte Coulomb-Streuamplitude angegeben:

$$f_{C,k}(\vartheta) = - \frac{\chi}{2k \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} e^{-i\chi \ln \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} e^{2i\sigma_0}$$

$$\chi = \frac{Ze^2 m}{\hbar^2 k}, \quad e^{2i\sigma_0} = \frac{\Gamma(1+i\chi)}{\Gamma(1-i\chi)}$$

Es ist nun klar, daß ein solcher Phasenfaktor im Interferenzterm von (II 33) eine Rolle spielt. Man erhält

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{e^2}{4E} \right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4 \frac{\vartheta}{2}} + \frac{1}{\cos^4 \frac{\vartheta}{2}} + \frac{2 \cos(\chi \ln \tan^2 \frac{\vartheta}{2})}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2} \cos^2 \frac{\vartheta}{2}} \right]$$

- Yukawa-Grenzübergang liefert Interferenzterm nicht.

- Antiproton (klassisch) sowieso nicht, aber für $\hbar \rightarrow 0$ oszilliert es sehr stark und kann von einem realistischen Detektor nicht aufgelöst werden.

III. Mehrerelektronenatome

52

- WDH: Ununterscheidbare Teilchen

Hamiltonian $\hat{H} = \hat{H}(1, 2, \dots, N)$

\uparrow
 \vec{r}_1, χ_1 Ort und Spin

Wellenfunktion $\psi = \psi(1, 2, \dots, N)$

Permutationsoperator $\hat{P}_{ij} \psi(\dots i \dots j \dots)$
 $= \psi(\dots j \dots i \dots)$

$\hat{P}_{ij}^2 = 1 \rightarrow$ Eigenwerte ± 1

Der Hamiltonian ist symmetrisch unter

Teilchenaustausch

$$\Rightarrow [\hat{P}, \hat{H}] = 0 \quad (\text{III.1})$$

\rightarrow wenn $\psi(1, \dots, N)$

Eigenfunktion von

\hat{H} zu Eigenwert E ,

dann auch $\hat{P}\psi = \psi'$

denn

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$\hat{P}\hat{H}\psi = \hat{P}E\psi$$

$$\stackrel{(\text{III.1})}{=} \hat{H} \underbrace{\hat{P}\psi}_{\psi'} = E \underbrace{\hat{P}\psi}_{\psi'}$$

In der Natur treten für identische Teilchen nur symmetrische bzw. anti-symmetrische Zustände auf

$$\hat{P}_{ij} \psi(\dots i \dots j \dots) = \pm \psi(\dots j \dots i \dots)$$

Für zwei Teilchen:

Symmetrisch

$$\psi_s = \psi(1,2) + \psi(2,1)$$

Bosonen

ganzzahliges Spin

(aus Feldtheorie)

antisymmetrisch

$$\psi_a(1,2) = \psi(1,2) - \psi(2,1)$$

Fermionen

halbzahliges Spin

Beispiele:

Mesonen π, K, ρ, ω

Photonen γ

Leptonen

e, μ, τ

Baryonen

p, n

Λ, Σ, \dots

oder ein Level Hefes:

Eichbosonen W^\pm, Z^0, γ

Gluonen

Higgs?

Leptonen

Quarks

- Für Fermionen folgt aus

$$P_{ij} \psi(\dots i \dots j \dots) = -\psi(\dots i \dots j \dots)$$

dass $\psi(\dots \vec{x} \dots \vec{x} \dots) = 0$

(Pauli-Verbot)

- Nicht-wechselwirkende Teilchen:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}(i)$$

⇒ Schrödinger-Gl. zerfällt in Einzelteilchen-Schrödinger-Gleichungen

$$\hat{H}\psi = E\psi \rightarrow \hat{H}(i)\psi_{\alpha_i}(i) = E_{\alpha_i}\psi_{\alpha_i}(i)$$

bezeichnet Zustand.

und Gesamtenergie ist Summe aus Einzelteilchenenergien.

$$E = E_{\alpha_1} + E_{\alpha_2} + \dots + E_{\alpha_N}$$

- Beispiel: zwei Teilchen

$$\hat{H} = \hat{H}(1) + \hat{H}(2), \quad \hat{H}(i)\psi_{\alpha_i}(i) = E_{\alpha_i}\psi_{\alpha_i}(i)$$

$$(\hat{H}(1) + \hat{H}(2)) \underbrace{\psi_{\alpha_1}(1)\psi_{\alpha_2}(2)}_{\text{Ansatz}} = E \psi_{\alpha_1}(1)\psi_{\alpha_2}(2)$$

$$\underbrace{E_{\alpha_1}\psi_{\alpha_1}(1)}_{\text{wirkt nur hierauf}} \psi_{\alpha_2}(2) + \psi_{\alpha_1}(1) \underbrace{E_{\alpha_2}\psi_{\alpha_2}(2)}_{\text{wirkt nur hierauf}} = E \psi_{\alpha_1}(1)\psi_{\alpha_2}(2)$$

$$E_{\alpha_1} + E_{\alpha_2} = E$$

- Produktwellenfunktion aus Einzelteilchenlog.

wird durch Operator Anzahl zweierpermutationen

$$\hat{A}^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p (\pm 1)^p \hat{P}$$

Symmetrisiert (+) bzw. anti-symmetrisiert (-).

- Für Fermionen kann man das auch als Determinante (Slater-Det.) schreiben:

$$\hat{A} \begin{matrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \dots \\ \psi_N \end{matrix} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \dots & \psi_1(N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_N(1) & \dots & \psi_N(N) \end{vmatrix}$$

Teilchenaustausch bedeutet vertauschen von Spalten.

Zwei Zustände gleich \rightarrow zwei Zeilen gleich \rightarrow Det. verschwindet \rightarrow Pauli-Verbot.

- Freie Teilchen im Kasten:

$$V = L^3$$

Einzelteilchenwellenfunktionen sind ebene Wellen

$$\psi_{\vec{p}} \sim e^{i\vec{p} \cdot \vec{r} / \hbar}$$

\vec{p} bezeichnet Zustand

Einzelteilchenenergie $E_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2m}$, $E = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$

Periodische Randbed. \leftarrow mit Randbed. führen aufs Gleiche (\rightarrow Umrang)

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{L} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} \quad |n_j| = 1, 2, 3, \dots$$

für $j=1, 2, 3$

Bosonen: alle Teilchen können im niedrigsten Zustand sitzen (Bose-Einstein-Kondensation)

Feststellen: jeder Impulszustand durch zwei Teilchen unterschiedlichen Spins beschreibbar (wir nehmen $S = \frac{1}{2}$, $S_z = \pm \hbar/2$ an). (Elektronen)

Kugel im Impulsraum

$$V_p = \frac{4}{3} \pi p_f^3$$

Fermi-Radius

Jedes unbesetzte Elektron benötigt $(\hbar \frac{2\pi}{L})^3$ an Impulsraumvolumen

$$\Rightarrow N = \frac{\frac{4}{3} \pi p_f^3}{\left(\hbar \frac{2\pi}{L}\right)^3} \cdot 2 = \frac{(p_f \hbar)^3}{3\pi^2} L^3,$$

Spin

also folgt für die Teilchendichte

$$n = \frac{N}{L^3} = \frac{(p_f \hbar)^3}{3\pi^2}$$

Energie

$$E = 2 \sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} = 2 \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \int d^3r \frac{p^2}{2m}$$

$$= 2 \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 4\pi \frac{1}{2m} \int_0^{p_f} dp p^2 \cdot p^2$$

$$= \frac{4\pi}{m} \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \frac{1}{5} p_f^5 = \frac{3}{2m} N \frac{1}{5} p_f^2$$

$$\frac{N}{2 \cdot \frac{4}{3} \pi p_f^3} = \frac{3}{5} N \frac{p_f^2}{2m}$$

Fermi-Energie

- Zusammengesetzte Teilchen

Beispiel: Wellenfunktion für zwei H-Atome:

$$\psi(p_1 e_1, p_2 e_2) = -\psi(p_1 e_2, p_2 e_1)$$

↑ ↑
Proton Elektron

$$= +\psi(p_2 e_2, p_1 e_1),$$

↖ ↗
da Elektronen Fermionen
↖ ↗
Vertauschenwechsel, da auch
Protonen Fermionen sind

⇒ H-Atom als Ganzes ist Boson

Allgemein: Anzahl Fermionen ungerade →
auch Gesamtteilchen Fermion

Baryonen: 3 Quarks → Fermion

Mesonen: 2 " → Boson

${}^3\text{He}$: 2p + 1n → Fermion

${}^4\text{He}$: 2p + 2n → Boson

III.1 Helium

- einfachstes Mehrerelektronenatom

- He-ähnlich: H^- , Li^+ , Be^{2+} , ... U^{90+}

- Hamiltonian (ohne Spin-Bahn etc.)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$= \hat{H}(1) + \hat{H}(2) + V$$

↑ ↑
Wasserstoffartig

↑
elektrostatische
Abstoßung

- Vernachlässigung des WW, $\hat{V} = 0$, größte Näherung
Wie wir oben gesehen haben, zerfällt das
Problem dann in zwei Einzelteilchenprobleme

Produktzustand $| \psi \rangle = | n_1 l_1 m_1 \rangle | n_2 l_2 m_2 \rangle$

Schrodinger-Gl.

$$[\hat{H}(1) + \hat{H}(2)] | \psi \rangle = (E_{n_1} + E_{n_2}) | \psi \rangle$$

wobei

$$E_n = - \frac{m z^2 e^4}{2 \hbar^2 n^2} = - \frac{m c^2}{2} \alpha^2 \frac{z^2}{n^2} = - \frac{z^2}{n^2} R_y$$

\uparrow $\quad \quad \quad \uparrow$
 $\approx \frac{1}{137}$ $\quad \quad \quad 13.6 \text{ eV}$

die wasserstoffartigen Eigenenergien sind.

Damit erhalten wir als mögliche Konfigu-
rationen

n_1	n_2	$E [R_y]$
1	1	-8
1	2	$-\frac{4}{1} - \frac{4}{4} = -5$
1	3	$-4 - \frac{4}{9} = -40/9$
⋮	⋮	
1	∞	-4 (-54.5 eV)
2	2	$-\frac{4}{4} - \frac{4}{4} = -2$

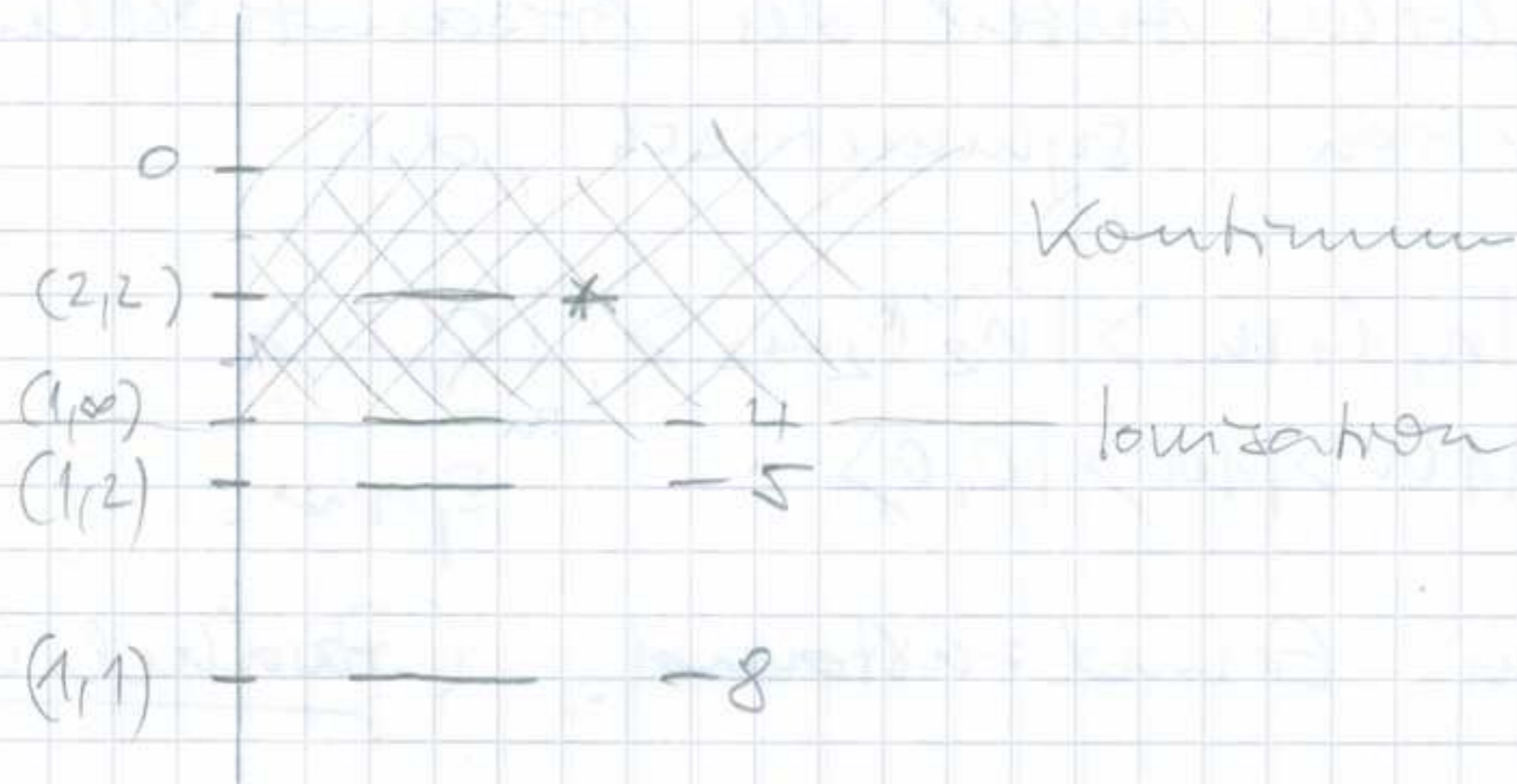
- Ionisierungsenergie

$$E_{\text{ion}} = E(\text{He}^+ + e) - E(\text{He})$$

\swarrow mit 0 km Energie ↖ im Grundzustand

$$= -4 - (-8) = 4 R_y$$

- Der $(n_1, n_2) = (2, 2)$ -Zustand ist der niedrigste doppeltangeregte Zustand und liegt energetisch bereits höher als der einfach ionisierte Zustand:



* ist autoionisierender Zustand bzw. Resonanz in der $\text{He}^+ + e^-$ -Streuung

- Bisher haben wir noch nicht antisymmetrisiert:
 - die beiden Spins können sich zu 0 oder 1 addieren

$$\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2 \Rightarrow S = 0, 1$$

\uparrow \nwarrow
 $|S_1 - S_2|$ $S_1 + S_2$

Spin-Eigenzustand für $S=0$ (Spin-Singlet)

$$|S, m_S\rangle = |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

Spin-Eigenzustände für $S=1$

$$|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$$

- Offenbar ist der Spin-Singlet Zustand
antisymmetrisch,

$$\hat{P}_{12} |0,0\rangle = -|0,0\rangle$$

⇒ räumlicher Anteil der Gesamtwellenfunktion symmetrisch, d.h.

$$\begin{aligned} |0_p\rangle &= |n_1 l_1 m_1\rangle |n_2 l_2 m_2\rangle |0,0\rangle \\ &= |100\rangle |100\rangle |0,0\rangle \end{aligned}$$

Spin

für den Grundzustand (Parahelium)

- Spin-Triplet-Zustand bzgl. Spin symmetrisch,
räuml. Anteil anti-symm.

$$|0_o\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle |2lm\rangle - |2lm\rangle |100\rangle) |1, m_s\rangle$$

(Orthohelium)

- Übung: Zeige, dass die Zustände

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle |2lm\rangle |\uparrow\downarrow\rangle - |2lm\rangle |100\rangle |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\quad \quad |\downarrow\uparrow\rangle - \quad \quad \quad \quad |\uparrow\downarrow\rangle)$$

nicht Eigenzustände des Gesamtspins.

sind und zudem die Coulomb-

Abstoßung \hat{V} nicht diagonal in ihnen

ist (und sie daher für Störungstheorie

ungeeignet sind).