Theoretische Physik: Fortgeschrittene Vielteilchentheorie, Übung 5

Prof. Dr. Hans Peter Büchler WS 2012/13, 13. November 2012

1. Eigenschaften des Permutationsoperators (Übungsstunde)

Wir betrachten ein System von zwei Teilchen in einer Raumdimension $x \in \mathbb{R}$. Der Operator, der im Produktraum $\mathcal{H}_B = \mathcal{H}_B^{(1)} \otimes \mathcal{H}_B^{(2)}$ der Einteilchen-Bahnhilberträume $\mathcal{H}_B^{(1)}$, $\mathcal{H}_B^{(2)}$ der Vertauschung der Bahnzustände der beiden Teilchen zugeordnet ist, kann formal durch seine Wirkung im Basissystem der gemeinsamen Eigenzustände $|x_1 x_2\rangle = |x_1\rangle^{(1)} |x_2\rangle^{(2)}$ der Ortsoperatoren von Teilchen 1 und 2 gemäß

$$P_{(12)}^B |x_1 x_2\rangle := |x_2 x_1\rangle \, , \; \forall \, x_1, x_2 \in \mathbb{R} \tag{1}$$

definiert werden. Der Operator $P_{(12)}^B$ wird als Permutationsoperator in $\mathcal{H}_B$ zur Permutation $p = (12)$ des Zweiteilchensystems bezeichnet. Zeige, dass für den Operator $P_{(12)} \equiv P_{(12)}^B$

a) $P_{(12)}^{-1} = P_{(12)}^\dagger = P_{(12)}$ gilt;

b) $P_{(12)}$ nur die Eigenwerte $c_{(12)} = +1, -1$ besitzen kann;

c) die Vektoren

$$\begin{aligned}
|xx\rangle_S &:= |xx\rangle \, , \\
|x_1 x_2\rangle_S &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|x_1 x_2\rangle + |x_2 x_1\rangle \right) \, , \; x_1 < x_2 \\
|x_1 x_2\rangle_A &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|x_1 x_2\rangle - |x_2 x_1\rangle \right) \, , \; x_1 < x_2
\end{aligned}$$

Eigenvektoren von $P_{(12)}$ sind.

2. Hundsche Regeln (Schriftlich)

Die Elektronenkonfiguration gibt die Verteilung der Elektronen auf verschiende Orbitale eines Atoms an. Der Zustand eines Elektrons ist bestimmt durch vier Quantenzahlen: Hauptquantenzahl n(1,2,3,...), Neben- oder Drehimpulsquantenzahl l $(0, .., n-1)$, magnetische Drehimpulsquantenzahl m_l $(-l, .., +l)$ und die Spinquantenzahl $m_s(-1/2, 1/2)$. Die Hauptquantenzahl gibt die Schale, die Nebenquantenzahl die Unterschale (l=0=s, 1=p, 2=d usw.) an. Beginnend bei der Schale mit der niedrigster Energie, werden in einem Atom die Schalen durch die vorhandenen Elektronen, aufgefüllt. Dabei ist zu beachten, dass durch das Pauliprinzip kein Zustand doppelt besetzt werden kann und jeder Zustand nur einfach besetzt ist. Dadurch addieren sich in einer abgeschlossenen Schale die Drehimpulse und Spins der Elektronen zu $\vec{0}$. Ist jedoch eine Schale nicht vollständig besetzt, so addieren sich die Bahndrehimpulse und die Spins der Elektronen zu einem Gesamtdrehimpuls $\vec{J}$. Dabei sind je nach Zustand der einzelnen Elektronen mehrere entartete Kombinationen der Drehimpulse und Spins mit der selben Hauptquantenzahl n möglich.

Die Entartung der Energien in einer Schale wird durch Spin-Bahn-Kopplung und Elektron-Elektron-Wechselwirkung aufgehoben. Die Drehimpulskonfiguration der Elektronen im Grundzustand kann mit Hilfe der Hundschen Regeln gefunden werden.

i) Volle Schalen geben keinen Beitrag zu den Bahn-/Spin- Drehimpulsen L und S.

ii) Das LS-Multiplett mit dem größten S hat die kleinste Energie.

iii) Bei mehreren L mit gleichem S hat das größte L die kleinste Energie.

iv) Ist die Schale weniger als halb voll oder halb voll, dann ist $J = |L - S|$ minimal, ist die Schale mehr als halb gefüllt, dann ist $J = L + S$ maximal.

Betrachte nun Kohlenstoff C in der Elektronenkonfiguration $1s^2 2s^2 2p^2$.

a) Bestimme die Produktbasis des Systems der Elektronen in der nicht voll besetzten Unterschale. Welche Zustände fallen unter Berücksichtigung des Pauliprinzips heraus? Wie groß ist die Entartung?

b) Bestimme **sämtliche** Bahndrehimpuls- und Spinkombinationen (LS-Multiplett) und gebe das dazugeörige Termsymbol ${}^{2S+1}L_J$ an.

c) Benenne nun die LS-Kombinationen, welche durch das Pauliprinzip erlaubt sind.
(**Tip:** Beachte dass die totale Wellenfunktion antisymmetrisch sein muss. Separiere die Gesamtwellenfunktion in einen Spin- und Bahnanteil. Reduziere beide separat aus um Aussagen über deren Symmetrie treffen zu können und kombiniere anschließend: $(\vec{s}_1 \otimes \vec{s}_2) \otimes (\vec{l}_1 \otimes \vec{l}_2))$

d) Bestimme mit Hilfe der Hundschen Regeln den Grundzustand.

3. Wigner-Eckart-Theorem (Schriftlich)

$\hat{\vec{A}}$ und $\hat{\vec{B}}$ seien beliebige Vektoroperatoren (d.h. sie transformieren sich bei Raumdrehungen wie der Ortsvektor $\vec{r}$). Begründe:

$$\left\langle \alpha' l' m' \middle| \hat{\vec{A}} \middle| \alpha l m \right\rangle = C \cdot \left\langle \alpha' l' m' \middle| \hat{\vec{B}} \middle| \alpha l m \right\rangle \tag{2}$$

mit einer von m, m' unabhängigen Konstante C.