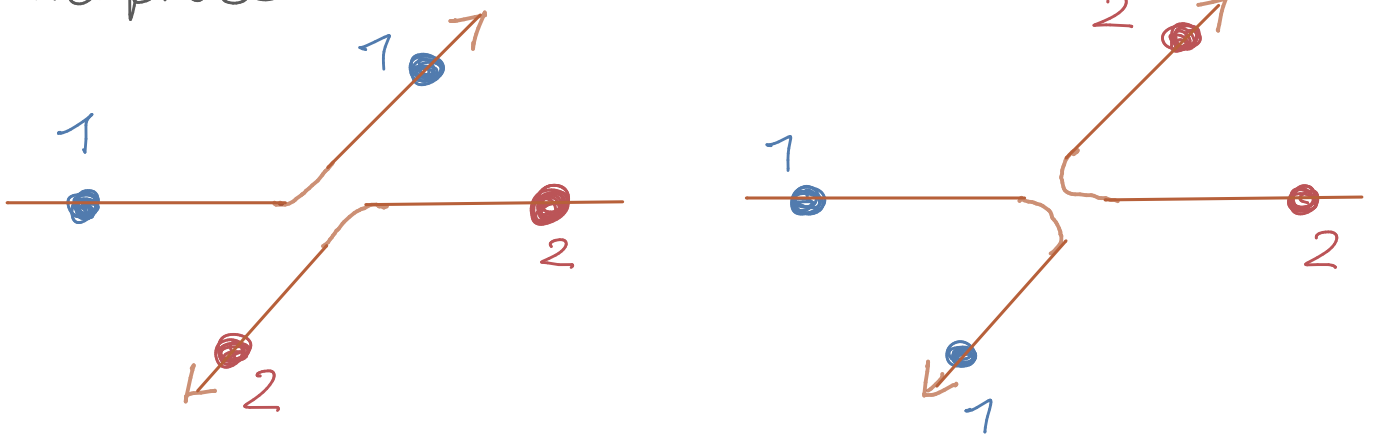


XII. Quantenmechanik von Systemen identischer Teilchen

12.1 Ununterscheidbarkeit identischer Teilchen

In der klassischen Mechanik können wir Teilchen mit identischen inneren Eigenschaften (Masse, Ladung, Farbe, ...) stets unterscheiden, selbst bei einem Streuprozess:



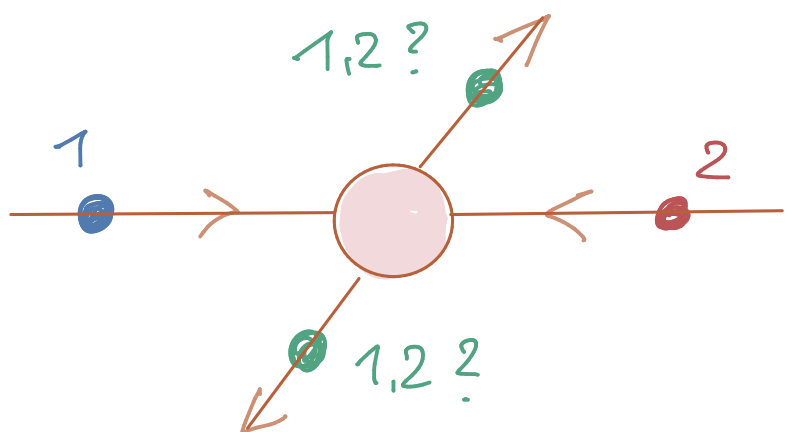
klassisch unterscheidbare Prozesse, da
Trajektorien verfolgbar

quantenmechanische
Streuung

wegen Unschärfe

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Teilchen nach Streuung
nicht mehr zuordnbar



Def: Transpositionoperator $\hat{P}_{ij}$, $i < j$

linearer Operator in

$$\mathcal{H}_n = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H} = \otimes^n \mathcal{H}$$

$$\text{Sei } |\varphi\rangle = |\phi_1\rangle |\phi_2\rangle \dots |\phi_n\rangle$$

$$(648) \quad \hat{P}_{ij} |\phi_1\rangle \dots |\phi_i\rangle \dots |\phi_j\rangle \dots |\phi_n\rangle \equiv \\ \equiv |\phi_1\rangle \dots |\phi_j\rangle \dots |\phi_i\rangle \dots |\phi_n\rangle$$

Eigenschaften:

$$(649) \quad \hat{P}_{ij} = \hat{P}_{ij}^\dagger \quad \hat{P}_{ij}^2 = \mathbb{1}$$

Eigenwerte: $\lambda = \pm 1$

Schwaches Symmetriepostulat

Alle Observable eines Systems identischer Teilchen sind selbstadjungierte Operatoren $\hat{A}$ die symmetrisch unter Transposition von Teilchen sind

$$(650) \quad [\hat{A}, \hat{P}_{ij}] = 0 \quad \hat{A} = \hat{P}_{ij} \hat{A} \hat{P}_{ij} \quad \forall i, j$$

$\Rightarrow$ Einschränkung im Raum der Observablen

$$(651) \quad \langle \varphi | \hat{A} | \varphi \rangle = \langle \hat{P}_{ij} \varphi | \hat{A} | \hat{P}_{ij} \varphi \rangle$$

Bspl:

- Schwerpunkt $\vec{R} = \frac{1}{2} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$ ist Observable ✓
- Relativkoordinaten $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ keine Observable
aber $|\vec{r}| = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ ist Observable ✓
- 2-Teilchen Hamiltonoperator ist Observable ✓
$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m} + V(\vec{r}_1) + V(\vec{r}_2) + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$$

12.2 Der Hilbertraum identischer Teilchen: Bosonen und Fermionen

Die Menge aller paarweisen Transpositionen $\{\hat{P}_{ij}\}$ in einem N -Teilchensystem bildet bzgl. der Hintereinanderausführung eine Gruppe:

die Permutationsgruppe S_N

Sei "1, 2, 3, ..., N " die natürliche Reihenfolge. Dann versteht man unter dem Signum einer Permutation $\tau \in S_N$, abgekürzt als $\text{sgn}(\tau)$ die Zahl $(-1)^m$ wobei m die Anzahl der Transpositionen benachbarter Elemente bezeichnet, die nötig sind um τ zu erzeugen.

Der Hilbertraum $\mathcal{H}_N = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}}_N$

zerfällt unter der Permutationsgruppe in invariante Unterräume

(652) $\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_s \otimes \mathcal{H}_{as} \otimes \dots$

Dabei ist

- Raum der total symmetrischen Zustände

(653) $\mathcal{H}_s = \{ |\varphi\rangle \in \mathcal{H}_N \mid \hat{P}_{ij} |\varphi\rangle = |\varphi\rangle \quad \forall i < j \}$

- Raum der total antisymmetrischen Zustände

(654) $\mathcal{H}_{as} = \{ |\varphi\rangle \in \mathcal{H}_N \mid \hat{P}_{ij} |\varphi\rangle = -|\varphi\rangle \quad \forall i < j \}$

Bem: • Für $N=2$ gibt es nur $\mathcal{H}_s$ und $\mathcal{H}_{as}$

- Für $N \geq 3$ gibt es Unterräume mit gemischten Symmetrieeigenschaften

Die nach dem schwachen Symmetriepostulat erlaubten Observablen bilden $\mathcal{H}_s$ und $\mathcal{H}_{as}$ jeweils auf sich ab.

starkes Symmetriepostulat

Die erlaubten Zustände (Dichteoperatoren) von Systemen identischer Teilchen sind entweder total symmetrisch, d.h. Elemente aus $\mathcal{H}_s$, oder total antisymmetrisch, d.h. Elemente aus $\mathcal{H}_{as}$.

Folgerung: Superauswahlregel

Die Unterräume $\mathcal{H}_s$ und $\mathcal{H}_{as}$ können durch Observable nicht miteinander verknüpft werden, d.h. alle Übergangsmatrixelemente verschwinden.

Fermionen

$$(655) \quad \mathcal{H}_{as}^{(N)} = \bigotimes^{as N} \mathcal{H}$$

Abschließung des Raumes aller endlicher Linearkombinationen der Form

$$(656) \quad |\Psi\rangle = \sum_{\tau \in S_N} \text{sgn}(\tau) |\phi\rangle_{\tau(1)} |\phi\rangle_{\tau(2)} \cdots |\phi\rangle_{\tau(N)}$$

wobei $|\phi\rangle_i \in \mathcal{H}$

Bem: offensichtlich ist $|\psi\rangle \neq \vec{0}$ nur falls alle $|\phi\rangle_i$ linear unabhängig von einander sind!

Pauli Prinzip

In einem System identischer Fermionen kann jeder (linear unabhängige) Einteilchenzustand nur einmal besetzt werden.

Bosonen

(657)

$$\mathcal{H}_S^{(N)} = \overset{S}{\otimes}^N \mathcal{H}$$

Abschließung des Raumes aller endlichen Linearkombinationen

(658)

$$|\psi\rangle = \sum_{\tau \in S_N} |\phi\rangle_{\tau(1)} |\phi\rangle_{\tau(2)} \cdots |\phi\rangle_{\tau(N)}$$

wobei $|\phi\rangle_i \in \mathcal{H}$

Bem: Ein Einteilchenzustand kann hier mehrfach besetzt sein.

Spin-Statistik Theorem

Identische Teilchen mit ganzzahligem Spin $s=0,1,2,\dots$ werden durch Zustände in $\mathcal{H}_s^{(N)}$ (Bosonen) beschrieben. Identische Teilchen mit halbzahligem Spin $s=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\dots$ werden durch Zustände in $\mathcal{H}_{as}^{(N)}$ (Fermionen) beschrieben.

Beweis: ohne (siehe relativistische QFT)

Frage: Müssen alle Elektronen im Universum stets durch antisymmetrische Vielteilchen Zustände geschrieben werden?

Unterscheidbarkeit identischer Teilchen

Makroskopisch getrennte, identische Teilchen können als unterscheidbar angesehen werden!

- Einteilchenzustände $\{|f\rangle, |g\rangle, \dots\}$

- "makroskopisch getrennt":

Träger von $\langle \vec{x} | f \rangle$ B_1 mit $B_1 \cap B_2 = \emptyset$
 $\langle \vec{x} | g \rangle$ B_2

Seien $\hat{P}_1$ und $\hat{P}_2$ Projektoren auf die
Raumbereiche B_1 bzw. B_2

$$\hat{P}_1|f\rangle \simeq |f\rangle \quad \text{aber} \quad \hat{P}_1|g\rangle \simeq 0$$

$$\hat{P}_2|g\rangle \simeq |g\rangle \quad \text{aber} \quad \hat{P}_2|f\rangle \simeq 0$$

Für alle lokalen Einteilchenobservablen $\hat{A}$ gilt

$$\hat{P}_1 \hat{A} \hat{P}_2 = \hat{P}_2 \hat{A} \hat{P}_1 = 0$$

Sei nun

$$|\psi\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|f\rangle_A |g\rangle_B \pm |g\rangle_A |f\rangle_B \right)$$

symmetrischer / antisymmetrischer Zustand
in $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ und

$$\hat{A} = \hat{A}_A + \hat{A}_B$$

Einteilchen-

$$\hat{B} = \hat{A}_A \hat{A}_B$$

Zweiteilchenoperator

$\Rightarrow$

$${}_{\pm} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle_{\pm} = \frac{1}{2} \left\{ \left(\langle g |_B \langle f |_A \pm \langle f |_B \langle g |_A \right) (\hat{A}_A + \hat{A}_B) \cdot \left(|f\rangle_A |g\rangle_B \pm |g\rangle_A |f\rangle_B \right) \right\}$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \langle f |_A \hat{A}_A |f\rangle_A + \langle g |_B \hat{A}_B |g\rangle_B + \right.$$

$$+ \underbrace{\langle g | \hat{A}_A | g \rangle_A + \langle f | \hat{A}_B | f \rangle_B + \dots}_{\equiv 0} \pm \left(\langle g | \hat{A}_A | f \rangle_A + \dots \right) \}$$

$\Rightarrow$ Symmetrisierung / Antisymmetrisierung ist irrelevant

12.3 Zwei Elektronen im Coulombpotential

Hilbertraum

$$(659) \quad \mathcal{H} = \left(\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2 \right)^{\text{as}} \otimes \left(\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2 \right)$$

Hamiltonoperator (in Ortsdarstellung)

$$(660) \quad \hat{H} = \sum_{j=1}^2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_j - \frac{Ze^2}{|\vec{r}_j|} \right) + \frac{ke^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Einteilchenhamiltonoperatoren Wechselwirkungsoperator

Erhaltungsgrößen

$$\vec{\hat{L}} = \vec{\hat{L}}_1 + \vec{\hat{L}}_2$$

$$\vec{\hat{S}} = \vec{\hat{S}}_1 + \vec{\hat{S}}_2$$

$$(66c) \quad [\hat{H}, \hat{L}_j] = [\hat{H}, \hat{S}_j] = 0 \quad j = x, y, z$$

Satz paarweise kommutierende Operatoren

$$\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z, \hat{P}_{12}$$

Da wir nur zwei Teilchen betrachten, gilt die Zerlegung des totalen antisym. Hilbertraum

$$(662) \quad \mathcal{H}_{as}^{(2)} = (\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2)^{as} (\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \otimes \mathbb{C}^2) \\ = \mathcal{H}_{(0)} \oplus \mathcal{H}_{(1)}$$

wobei

$$(663) \quad \mathcal{H}_{(0)} = \left[\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \overset{s}{\otimes} \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \right] \otimes \left[\mathbb{C}^2 \overset{as}{\otimes} \mathbb{C}^2 \right]$$

symmetrische Ortsraum-
wellenfunktion

anti-symmetrische
Spinwellenfunktion

und

$$(664) \quad \mathcal{H}_{(1)} = \left[\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \overset{as}{\otimes} \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3) \right] \otimes \left[\mathbb{C}^2 \overset{s}{\otimes} \mathbb{C}^2 \right]$$

antisymmetrische Ortsraum-
wellenfunktion

symmetrische
Spinwellenfunktion

Konstruktion der Wellenfunktionen

(i) $\mathbb{C}^{2 \text{ as}} \otimes \mathbb{C}^2$ ist eindimensional

$$(665) \quad |\chi_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle - |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle)$$

$$\hat{S}_z |\chi_{00}\rangle = (\hat{S}_z^1 + \hat{S}_z^2) |\chi_{00}\rangle = 0$$

dasselbe gilt für x, y Komponenten

$$(666) \quad \hat{S}_x |\chi_{00}\rangle = \hat{S}_y |\chi_{00}\rangle = \hat{S}_z |\chi_{00}\rangle = 0$$

Damit ist $|\chi_{00}\rangle$ EZ von $\hat{S}^2$ zu $S=0$

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 |\chi_{00}\rangle &= (\hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\vec{\hat{S}}_1 \cdot \vec{\hat{S}}_2) |\chi_{00}\rangle \\ &= (\hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_1^+ \hat{S}_2^- + \hat{S}_1^- \hat{S}_2^+ + \hat{S}_1^- \hat{S}_1^+ + \hat{S}_2^- \hat{S}_2^+) |\chi_{00}\rangle \end{aligned}$$

$$\text{mit } \hat{S}_- |\downarrow\rangle = 0 \quad \hat{S}_+ |\uparrow\rangle = 0$$

$$\hat{S}_+ |\downarrow\rangle = \hbar \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)} |\uparrow\rangle = \hbar |\uparrow\rangle$$

$$\hat{S}_- |\uparrow\rangle = \hbar \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)} |\downarrow\rangle = \hbar |\downarrow\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{S}^2 |\chi_{00}\rangle = \hbar^2 \left(\frac{3}{4} + \frac{3}{4} + 2 \cdot 0 - 1 - \frac{1}{2} \right) |\chi_{00}\rangle = 0$$

Spin Singlet

$$\hat{S}_j |\chi_{00}\rangle = 0 \quad \hat{S}^2 |\chi_{00}\rangle = 0 \quad (667)$$

(ii) $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ ist dreidimensional

$$|\chi_{11}\rangle = |\uparrow\rangle |\uparrow\rangle \quad S=1 \quad M_S = +1$$

$$|\chi_{10}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle) \quad S=1 \quad M_S = 0$$

$$|\chi_{1-1}\rangle = |\downarrow\rangle |\downarrow\rangle \quad S=1 \quad M_S = -1$$

(668)

Spin Triplet

Damit bekommen wir insgesamt

$$\mathcal{H}_{(0)} \quad \Psi = \phi^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \otimes \chi_{00}$$

$$\mathcal{H}_{(1)} \quad \Psi = \phi^{(as)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \otimes \chi_{1\mu}$$

(669)

$\mu = +1, 0, -1$

12.4 Vielteilchenwellenfunktionen identischer Teilchen

Nun wollen wir Satze für vollständig symmetrische bzw. vollständig antisymmetrische N -Teilchenzustände konstruieren.

Es sei $\{ \phi_k(\vec{r}) \}_{k \in \mathbb{N}}$ VONB von
Einteilchenzuständen

(A) antisymmetrische Wellenfunktion von N Teilchen

$$\phi_{l_1 l_2 \dots l_N}^{(as)} = \frac{1}{N!} \sum_{\tau \in S_N} \text{sgn}(\tau) \phi_{l_{\tau(1)}}(\vec{r}_1) \phi_{l_{\tau(2)}}(\vec{r}_2) \dots \phi_{l_{\tau(N)}}(\vec{r}_N)$$

$$l_1 < l_2 < \dots < l_N$$

(670)

Slater Determinante

$$\begin{aligned} \phi_{l_1 l_2 \dots l_N}^{(as)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) &= \\ &= \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \phi_{l_1}(\vec{r}_1) & \phi_{l_2}(\vec{r}_1) & \dots & \phi_{l_N}(\vec{r}_1) \\ \phi_{l_1}(\vec{r}_2) & \phi_{l_2}(\vec{r}_2) & \dots & \phi_{l_N}(\vec{r}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{l_1}(\vec{r}_N) & \phi_{l_2}(\vec{r}_N) & \dots & \phi_{l_N}(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \end{aligned}$$

r_1
 r_2
 $\vdots$
 r_N

l_1
 l_2
 $\dots$
 l_N

(B) symmetrische Wellenfunktion von N Teilchen

Jetzt mehr als ein Teilchen im selben Einteilchen-
zustand möglich!

n_{e_1} Anzahl der Teilchen in ϕ_{e_1}

n_{e_r} — " — in ϕ_{e_r}

Besetzungszahlen

$$r \leq N$$

$$(672) \quad n_{e_1} + n_{e_2} + \dots + n_{e_r} = N$$

$$\phi_{n_{e_1} n_{e_2} \dots n_{e_r}}^{(s)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \quad (673)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N! n_{e_1}! n_{e_2}! \dots n_{e_r}!}} \sum_{\tau \in S_N} \phi_{\tau(1)}(\vec{r}_1) \dots \phi_{\tau(N)}(\vec{r}_N)$$

Man sieht, daß Gl. (671) und (673) etwas unhandlich sind. Es gibt aber eine elegantere Art der "Buchhaltung"

12.5 Der Fock-Raum, Teilchenerzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Basisssysteme für N Teilchensysteme von Fermionen (total antisymmetrisch) und Bosonen (symmetrisch) sind durch Angabe der Besetzungszahlen