

Frage: Vielteilchenzustand $|\Phi_N\rangle$ für ein System unterscheidbar (identisch) Teilchen?

Idee: Konstruiere $|\Phi_N\rangle$ aus direkten Produkten von Einzelteilchenzuständen

Zentrale Forderung: Erwartungswerte von Vielteilchenobservablen \hat{A}_N müssen invariant gegenüber Vertauschung von Teilchenindizes sein

für System ununterscheidbar Teilchen

$$\begin{aligned} & \langle \Phi_N | \hat{A}_N | \Phi_N \rangle \\ & \langle \dots \phi_{\alpha_i}^{(i)} \dots \phi_{\alpha_j}^{(j)} \dots | \hat{A}_N | \dots \phi_{\alpha_i}^{(i)} \dots \phi_{\alpha_j}^{(j)} \dots \rangle \\ & \stackrel{!}{=} \langle \dots \phi_{\alpha_i}^{(j)} \dots \phi_{\alpha_j}^{(i)} \dots | \hat{A}_N | \dots \phi_{\alpha_i}^{(j)} \dots \phi_{\alpha_j}^{(i)} \dots \rangle \\ & = \langle \hat{P}_{ij} \Phi_N | \hat{A}_N | \hat{P}_{ij} \Phi_N \rangle \end{aligned}$$

Vertauschung mit Transpositionsoperator \hat{P}_{ij} Vertauscht Teilchenindizes

Eigenschaften: $\hat{P}_{ij}^2 = 1$
 $\Rightarrow \hat{P}_{ij} = \hat{P}_{ij}^{-1}$

Zweimalige Vertauschung von i und j führt auf Anfangszustand

außerdem: $\hat{P}_{ij}^+ = \hat{P}_{ij}$

denn man findet:

$$\langle \hat{P}_{ij} \Phi_N | \hat{P}_{ij} \Phi_N \rangle = \langle \Phi_N | \Phi_N \rangle$$

Erwartungswert bleibt unter Vertauschung der Teilchenindizes

$$\Rightarrow \langle \Phi_N | \hat{P}_{ij}^+ \hat{P}_{ij} | \Phi_N \rangle = \langle \Phi_N | \Phi_N \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{P}_{ij}^+ \hat{P}_{ij} = 1 \Rightarrow \hat{P}_{ij}^+ = \hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij}$$

(Allgemeine Permutation: $\hat{P} = \prod_{\text{Paare}} \hat{P}_{ij}$)

Zurück zur Forderung

$$\langle \hat{P}_{ij} \phi_N | \hat{A}_N | \hat{P}_{ij} \phi_N \rangle \stackrel{!}{=} \langle \phi_N | \hat{A}_N | \phi_N \rangle$$

$$\Rightarrow \hat{P}_{ij} + \hat{A}_N \hat{P}_{ij} \stackrel{!}{=} \hat{A}_N \quad | \text{ multipliziere von rechts mit } \hat{P}_{ij}$$

$$\underbrace{\hat{P}_{ij} + \hat{A}_N \hat{P}_{ij}}_{\hat{P}_{ij}} \underbrace{\hat{P}_{ij}}_1 \stackrel{!}{=} \hat{A}_N \hat{P}_{ij}$$

$$\hat{P}_{ij} \hat{A}_N \stackrel{!}{=} \hat{A}_N \hat{P}_{ij}$$

$$\Rightarrow [\hat{A}_N, \hat{P}_{ij}] = 0 \quad !$$

$$(\text{und es gibt auch } [\hat{A}_N, \hat{P}] = 0)$$

\Rightarrow Alle Observable \hat{A}_N (die alle N Teilchen einbeziehen) kommutieren mit allen Permutationsoperatoren!

Das gilt natürlich auch für den N -Teilchen Hamiltonoperator!

$$\stackrel{\text{insbesondere}}{\Rightarrow} [\hat{H}_N, \hat{P}_{ij}] = 0$$

\Rightarrow Damit (und weil \hat{P}_{ij} nicht explizit zeitabhängig) folgt:

\hat{P}_{ij} ist eine Erhaltungsgröße!

Erhaltungstheorem

Aus der Vertauschung von \hat{H} und \hat{P}_{ij} folgt auch:

zustand $|\phi_N\rangle$, der Eigenzustand von \hat{H}_N ist, ist auch Eigenzustand von \hat{P}_{ij} !

$$\text{also: } \hat{P}_{ij} |\phi_N\rangle \stackrel{!}{=} \lambda_{ij} |\phi_N\rangle$$

andernseits:

$$\langle \hat{P}_{ij} \phi_N | \hat{P}_{ij} \phi_N \rangle = \langle \phi_N | \hat{P}_{ij}^\dagger \hat{P}_{ij} | \phi_N \rangle = \langle \phi_N | \hat{P}_{ij} \hat{P}_{ij}^\dagger | \phi_N \rangle$$

$$\Rightarrow |\lambda_{ij}|^2 \langle \phi_N | \phi_N \rangle \stackrel{!}{=} \langle \phi_N | \phi_N \rangle$$

$$\Rightarrow |A_{ij}|^2 \stackrel{!}{=} 1$$

Da \hat{P}_{ij} hermitisch, sind die Eigenwerte λ_{ij} reell

$$\Rightarrow \lambda_{ij} = \pm 1$$

Damit: $\hat{P}_{ij} |\Phi_N^{(\pm)}\rangle = \pm |\Phi_N^{(\pm)}\rangle \quad \forall i, j$

Die (Eigen-)Zustände eines Systems identischer Teilchen (zum Hamiltonian H_N) sind gegenüber Vertauschung zweier Teilchenindizes entweder "symmetrisch" ($\lambda = +1$) oder "antisymmetrisch" ($\lambda = -1$)

Da \hat{P}_{ij} einer Erhaltunggröße entspricht, folgt:

Die Eigenschaft, ob ein System symmetrische oder antisymmetrische Zustände hat, ist "konstant der Bewegung"

Insgesamt folgt :

Ein Vielteilchen System hat eine zeitunabhängige Symmetrie charakter

Der Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$

zerfällt in $\mathcal{H}^{(+)}$: Raum der symmetrischen Zustände

$\mathcal{H}^{(-)}$: Raum der antisymmetr. "



Symmetrische und Antisymmetrische Zustände sind orthogonal

$$\langle \Phi_N^{(+)} | \Psi_N^{(-)} \rangle = \langle \Phi_N^{(+)} | \hat{P} | \Psi_N^{(-)} \rangle$$

Skalarprodukt aus symmetrischen und antisymmetrischen Zuständen

$$= \langle \Phi_N^{(+)} | \hat{P}_{ij} \hat{P}_{ij} | \Psi_N^{(-)} \rangle$$

$$= \frac{\langle \hat{P}_{ij} \Phi_N^{(+)} | \hat{P}_{ij} \Psi_N^{(-)} \rangle}{\langle \Phi_N^{(+)} | - | \Psi_N^{(-)} \rangle} = - \langle \Phi_N^{(+)} | \Psi_N^{(-)} \rangle$$

$$\Rightarrow \langle \Phi_N^{(+)} | \Psi_N^{(-)} \rangle = 0 \quad \text{orthogonal}$$

Es gilt:

- Sogenannte „Bosonen“-Systeme werden durch symmetrische Zustände charakterisiert

Die zugehörigen Teilchen haben ganzzahlige Spin
(Bosonen)

z.B. Protonen ($s=1$), π -Mesonen ($s=0$), α -Teilchen ($s=0$)
Phononen ($s=1$)

- „Fermionen“-Systeme werden durch antisymmetrische Zustände charakterisiert

Die zugehörigen Teilchen (Fermionen) werden durch halbzahlige Spin charakterisiert

z.B. Elektronen ($s=\frac{1}{2}$), Protonen ($s=\frac{1}{2}$), ...

Entscheidend ist also die Zusammenhang mit dem Spin

Spin-Statistik-Theorem

Aufgestellt von Pauli 1925, zunächst empirisch aus Deutery von Atomspektren
strenger Beweis (1940) im Rahmen der Quantenfeldtheorie!

Für Fermionen gilt das
Pauli-Prinzip

(gilt nicht für Bosonen!)

Zwei Fermionen können sich nicht in dem selben Einzelteilchenzustand befinden. Sie können nicht in allen Quantenzahlen übereinstimmen!

↔ Grundlage für den Aufbau von Atomgehäusen,
Periodensystem der Elemente

Frage nun:

Was sind die erlaubten Zustände $|\Phi_N^{(+)}\rangle$ bzw. $|\Phi_N^{(-)}\rangle$

(in $\mathcal{H}^{(+)}$) (in $\mathcal{H}^{(-)}$)

Tipp dazu an:

(Anti-)Symmetrisierungsoperatoren

$$\hat{S}_N^{(\pm)} = \frac{1}{N!} \sum_P (\pm 1)^P \hat{P}$$

Permutationsoperator
Ergebnis: $\hat{P} = \prod_{\text{Transposition}} \hat{P}_{ij}$

- Summe läuft über alle denkbaren Permutationen des N -Tupels $i=1,2,\dots,N$

- P (Ergebnis im Faktor $(\pm 1)^P$) ist die Zahl der Transpositionen, aus denen \hat{P} aufgebaut ist

- Faktor $(\pm 1)^P$ ist relevant für antisymmetrische Zustände (Fermionen)

- Zum Verhalten: Es gibt $N!$ Permutationen incl. Identität

- Wirkung: $\hat{S}_N^{(\pm)} \left(\underbrace{|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle |\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle}_{\text{direktes Produkt}} \right) = |\Phi_N^{(\pm)}\rangle$

Betrachte zunächst Fermionensysteme

Beispiel $N=2$

erste nichttriviale Permutation $\hat{P} = \hat{P}_{12}$, $p=0,1$

$$\Rightarrow \hat{S}_2^{(-)} = \frac{1}{2} (\hat{1} - \hat{P}_{12})$$

$$\hat{S}_2^{(-)} (|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle |\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle) = \frac{1}{2} (|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle |\phi_{\alpha_2}^{(2)}\rangle - |\phi_{\alpha_1}^{(2)}\rangle |\phi_{\alpha_2}^{(1)}\rangle)$$

Zur Illustration: Ortsdarstellung, ohne Spin $= |\phi_2^{(-)}\rangle$

$$\langle N_1, N_2 | \phi_2^{(-)} \rangle = \frac{1}{2} (\phi^{(1)}(N_1) \phi^{(2)}(N_2) - \phi^{(2)}(N_1) \phi^{(1)}(N_2))$$

Zugehörige Wahrscheinlichkeit: $\langle \phi_2^{(-)} | \phi_2^{(-)} \rangle = \dots$

Man findet: $\langle \phi_2^{(-)} | \phi_2^{(-)} \rangle = 0$

für $N_1 = N_2$!!

Für zwei identische Fermionen (ohne weitere Quantenzahlen, z.B. Spin) ist die Wkrsch., am selben Ort zu sein, gleich Null !!

$\hat{=}$ Pauli-Prinzip

Bemerkung zum Beispiel $N=2$

Einbeziehung des Spins?

geschieht typischerweise durch Produktansatz der Fermi $|\psi_2^{(-)}\rangle \rightarrow \underbrace{\phi(N_1, N_2)}_{\text{Ortswellenfunktion}} \chi(s_1, s_2)_{\text{Spinwellenfunktion}}$
 ↳ vernachlässigt also Spin-Bahn-Kopplung

Für 2 Fermionen muss dann entweder die Orts-Wellenfunktion oder die Spin-Wellenfunktion antisymmetrisch sein, die andere jeweils symmetrisch!

\Rightarrow führt insgesamt auf antisymmetrischen Zustand

N Fermionen

$$|\Phi_N^{(-)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(|\Phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \dots |\Phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \right)$$

$$= \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} |\Phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle & \dots & |\Phi_{\alpha_1}^{(N)}\rangle \\ |\Phi_{\alpha_2}^{(1)}\rangle & \dots & |\Phi_{\alpha_2}^{(N)}\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ |\Phi_{\alpha_N}^{(1)}\rangle & \dots & |\Phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \end{vmatrix}$$

„Slater-Determinante“

- Zeilen gehören zu denselben Quantenzahlen
- Spalten " " " Teilchenindizes

Beacht:

- sind in dem N-Teilchen Zustand 2 Sätze von Quantenzahlen gleich
also z.B. $\alpha_i = \alpha_j$ für $i \neq j$, dann impliziert dies die Gleichheit zweier Zeilen
 \Rightarrow Determinante wird Null!

\Leftrightarrow Pauli-Prinzip: Identische Teilchen können nicht in allen Quantenzahl übereinstimmen!

- Vertauschung zweier Teilchenindizes entspricht Vertauschung zweier Spalten
 \Rightarrow Vorzeichenwechsel!

($\hat{=}$ antisymmetr. Zustand)

Nach zu tun: Normierung:

$$\langle \Phi_N^{(-)} | \Phi_N^{(-)} \rangle = f_N^2 \langle \hat{S}_N^{(-)} (|\Phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \dots |\Phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle) | \hat{S}_N^{(-)} |\Phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \dots |\Phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \rangle$$

Normierungsfaktor zum Quadrat
direktes Produkt

$$\stackrel{\text{⊗}}{=} f_N^2 \langle \Phi_{\alpha_1}^{(1)} \dots \Phi_{\alpha_N}^{(N)} | (\hat{S}_N^{(-)})^+ \hat{S}_N^{(-)} | \Phi_{\alpha_1}^{(1)} \dots \Phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle$$

$$\stackrel{!}{=} 1$$

es gilt (hier ohne Beweis)

$$\left(\hat{S}_N^{(-)}\right)^{\dagger} = \hat{S}_N^{(-)} \quad \text{hermitisch}$$

$$\left(\hat{S}_N^{(-)}\right)^2 = \hat{S}_N^{(-)} \quad \text{Idempotenz ("Projektionsoperator")}$$

$$\text{also } \left(\hat{S}_N^{(-)}\right)^{\dagger} \hat{S}_N^{(-)} = \left(\hat{S}_N^{(-)}\right)^2 = \hat{S}_N^{(-)}$$

Einsatz in (*)

$$1 = f_N^2 \underbrace{\langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} \dots \phi_{\alpha_N}^{(N)} |}_{\substack{\text{dieses Produkt aus} \\ \text{Einteilchenzustand,} \\ \text{nicht anti-symmetrisch!}}} \underbrace{\left(\hat{S}_N^{(-)} \phi_{\alpha_1}^{(1)} \dots \phi_{\alpha_N}^{(N)} \right)}_{\text{Slater-Determinant}}$$

$$= f_N^2 \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \dots \langle \phi_{\alpha_N}^{(N)} | \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} |\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle & \dots & |\phi_{\alpha_1}^{(N)}\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ |\phi_{\alpha_N}^{(1)}\rangle & \dots & |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \end{vmatrix}$$

Anmerkung: Alle
Einteilchenzustand
schon
bereits benutzt!

$$= f_N^2 \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \rangle & \dots & \langle \phi_{\alpha_1}^{(1)} | \phi_{\alpha_2}^{(N)} \rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle \phi_{\alpha_1}^{(N)} | \phi_{\alpha_1}^{(1)} \rangle & \dots & \langle \phi_{\alpha_1}^{(N)} | \phi_{\alpha_N}^{(N)} \rangle \end{vmatrix}$$

$$= f_N^2 \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} 1 & 0 & \dots \\ \vdots & \ddots & \\ 0 & \dots & 1 \end{vmatrix} = f_N^2 \frac{1}{N!} 1 \stackrel{!}{=} 1$$

$$f_N = \sqrt{N!}$$

Ergebnis für anti-symmetrische Zustände.

$$|\Phi_N^{(-)}\rangle = \sqrt{N!} \hat{S}_N^{(-)} \left(|\phi_{\alpha_1}^{(1)}\rangle \dots |\phi_{\alpha_N}^{(N)}\rangle \right)$$